

## 電子光学入門

— 電子分光装置の理解のために —

(第7回)

嘉藤 誠

日本電子 (株) 〒 196-8558 東京都昭島市武蔵野 3-1-2

kato@jeol.co.jp

(2006年3月8日受理)

光学系がもつ収差は、光源から発せられる波面の変形を引き起こします。波面形状は光路長の積分から決定され、これをもちいれば、軌道方程式を扱うことなく収差係数の導出が行われます。本章では、電子軌道に伴う波動と波面収差に関しての定式化を行い、軸対称電子レンズの収差係数の表式を導きます。

### Introduction to Electron Optics for the Study of Energy Analyzing Systems (7)

M. Kato

JEOL Ltd., 3-1-2 Musashino, Akishima, Tokyo 196-8558.

kato@jeol.co.jp

(Received: March 8, 2006)

Aberration of an optical system causes the deformation of wave-fronts originating from a light source. This wave aberration is given by the integral of an optical length, and this fact enables us to derive aberration coefficients without solving a trajectory equation. In this chapter, the aberration coefficients of an electron lens are given under the wave aberration theory.

## 7 電子レンズの収差係数の導出

### 7.1 はじめに

電子レンズ系の収差は、1次軌道方程式にたいしての高次の補正として現れるものです。収差係数の表式を導くために、そのような高次の寄与を含んだ微分方程式を解くことができればよいわけです。しかし、この実行のためにはかなり長い手計算が必要であり、途中で物理的な意味を見失う可能性が少なくありません。

収差係数の導出のために、これとは別のアプローチがあります。電子軌道そのものではなく、それに伴

う波面を考えて、その形状と収差係数を結びつける方法です。この方が難しくなりそうに思えますが、しかし実際は、計算量は少なくてすみます。なぜかと言えば、微分方程式を解くという操作が実質上必要なくなるからです。この手法はアイコナル法とよばれます。

アイコナル法は、電子軌道を決定する変分原理から出発します。変分原理のもとになる積分は、軌道に沿っての「光路長」を与えるものです。一点から出る軌道の束を考え、その点から各軌道に沿っての等光路長の点をつなげば、波面の概念が生じます。これは真の波動性とは異なり、あくまで古典的な軌道に伴う概念ですが、しかし真の波動性を示唆していると思えます。

もちろん、電子は実際に量子力学的な波動性をもつ

ています。電子光学系においても、この波動性によって生じる効果、たとえば回折収差によるビームのボケを考慮しなければなりません。とは言え、レンズとしての動作を調べるために、いつも量子力学の波動方程式を解くというのは実際的ではありません。主役は、あくまで電子軌道でなければなりません。

変分原理をもちいれば、「電子軌道に付随した波」の概念が自然に得られます。これをもちいて、波面形状に収差の影響を取り入れた波面収差が導出されます。この波面収差は、収差理論のみならず、波動性と収差が同時に関与する問題、たとえば電子顕微鏡の結像理論において積極的に利用されるものです。

今回は、アイコナル法によって軸対称電子レンズの収差係数を導く過程を示します。軌道に付随した波というものの実感を得るために、まず波動性と変分原理の関係から述べます。この形式的な記述はすでに第3章で済んでいます。今回の議論によって、より具体的なイメージをもってもらえるはずです。磁場中の電子に付随した波は、非等方的な結晶中の光波と似たふるまいを示します。そのような現象を扱う結晶光学に関しても、簡単に触れます。

アイコナル法は、てっとりばやく像面での収差を導くのに適していますが、実際の問題には不十分となることがあります。電子顕微鏡においては像面の収差を知れば十分ですが、より一般の電子ビームの輸送系では、光学系のどこでどんな種類の収差が発生しているかを知る必要があります。このような目的のためには、微分方程式をもとにした定式化の方が適しています。これに関しては、後の回で述べる予定です。

なお、収差係数の導出を急がれる方は、波動性に関する節をとばして §7.4 から読んで頂いても支障ありません。

## 7.2 光線と波面

### 7.2.1 ホイヘンスの原理

波が空間を伝わる様子を説明するために、**ホイヘンスの原理 (Huygens' principle)** がしばしばもちいられます。これは、ある場所にできた波面上の各点が波源となって二次的な球面波を出し、そのような二次波の包絡面として次の波面がつけられるとするものです。

この原理は、光の反射や屈折の法則を、波のふるまいとしてうまく説明することができます。しかし、ホイヘンスの二次波というものが、ある限られた現象を説明するためだけに有効なのか、あるいは実在

と考えるとよいものなのかがはっきりしません。また包絡面という概念も、物理的にはあまりわかりやすいものではありません。

ホイヘンスの原理が出されたのちに、二次波の重ね合わせの効果として波面の伝播を説明できることが、フレネルによって示されています。これによって、ホイヘンスの言う包絡面というものが、強め合う干渉の結果として理解されることとなります。また、波面から二次波が放出される際の強度の方向依存性が考慮され、波の伝播が定量的にも説明可能であることが示されました。

これに引き続いて、キルヒホッフは、波動方程式の解が実際に二次波の重ね合わせの形で書けることを示しました。キルヒホッフがもちいたのは、グリーン関数によって偏微分方程式の境界値問題を解く手法です。境界上の各点で定義されるグリーン関数が、二次波を具体的に表現するものとして解釈されます。

キルヒホッフによる定式化は、ある程度簡略化した境界条件にたいしてだけ有効で、適用には限界があります。しかし、開口による光の回折のような単純な問題では十分な精度を与えます。よって二次波は、ある程度までは、定量的にも実在と見なしうるものであるわけです。

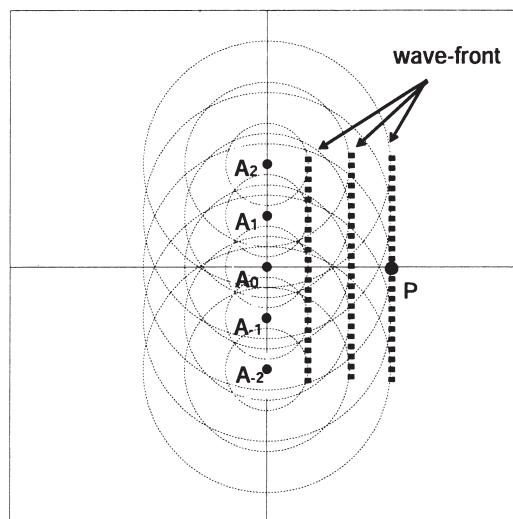


Fig. 1: Construction of wave-fronts formed by several wave sources.

具体的に、池の水面を伝わっていく波のような二次元的な波動を考えてみましょう。Fig.1のように、波源  $A_0, A_{\pm 1}, \dots$  が一直線上に並んでいて、これらが同じ振動数で、かつ位相をそろえて同心円状に波を放出しているとします。図では五つの波源しか描かれていませんが、実際には十分密に並んでいるとします。

池にたくさんの杭を直線上に立てて、それらが調子を合わせて上下に振動する状況を思い浮かべましょう。

各波源は自分を中心とした同心円状の波面を出し、波源の並びに平行な波面が次々につくられていきます。これらの波面は、幾何学的に言えば各波源からの円形波の包絡線です。ここでの説明では本当の波源からの波をもちいていますが、途中につくられた波面の各点が波源となって、それらの出す二次波によって下流の波面が構成されると考えることもできます。これがホイヘンスの原理です。

包絡線が波面になるという解釈によっては、物理現象として何が起きているのかがよくわかりません。現象のすべては、各波源からの波の重ね合わせによって説明されるはずですが、そこで、波面がつくられる過程を重ね合わせという観点から考察してみます。

このためには、観測点を固定して考えるとわかりやすくなります。図の  $P$  という観測点にむかって、各波源からやってくる波の位相を考えてみます。波源  $A_0$  とその近くの波源からの波は位相がそろっているので、強め合う干渉をおこします。波源  $A_0$  から離れた波源ほど位相がずれ、影響が弱まっていきます。

もちろん、波源  $A_0$  から離れた波源ほど  $P$  までの距離が遠くなっていくので、振幅が小さくなるという効果もあります。しかし、位相の関係のほうが重要です。各波源から  $P$  に至る際の位相変化は距離に比例するので、 $A_0$  から  $P$  に至る位相差が最小で、それ以外の波源からの波については位相差が大きくなります。

$A_0$  近傍の波源が強め合う干渉を起こすために、波源  $A_0$  から  $P$  までの位相差が「停留」になっていることが本質的です。最小であるかどうかは重要ではありません。この停留性が、すなわち位相がそろうということなのです。

この強め合う干渉によって、どのような波がつくられるのでしょうか。簡単のために、三つの波源  $A_{-1}$ ,  $A_0$ ,  $A_1$  だけを考え、これらから点  $P$  に至る波を重ね合わせてみます。Fig.2はその様子を示しています。 $P$  の近傍だけを考えれば、各波源からの波は平面波で近似できます。そこで、 $P$  で観測される波は、進行方向がわずかに違う三つの平面波の重ね合わせとなります。この重ね合わせを行うと、図に示したように  $A_0$  と  $P$  を結ぶ直線に沿って位相がそろい、強め合う干渉がおきます。

この合成の結果としてつくられる波は、直線  $A_0P$  の近くでだけ大きな振幅を持ち、 $A_0P$  に直交する波面をもつ平面波です。直線  $A_0P$  から離れると、三つ

の平面波の位相はそろわなくなり、振幅は減衰します。すなわち、 $A_0P$  に沿って細く絞られた「ビーム」がつくられます。もし本当に  $A_0$  とその近傍の波源だけが存在したとすれば、そのようなビームが実際につくられるはずですが。

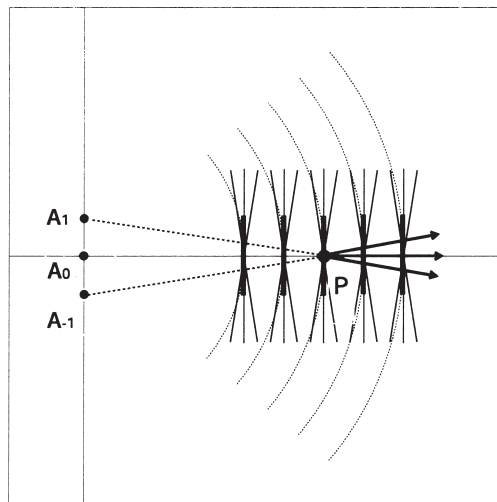


Fig. 2: Superposition of plane waves coming from  $A_{-1}$ ,  $A_0$  and  $A_1$  forms a beam existing along  $A_0P$ .

Fig.1にもどると、この図の状況は次のように解釈できます。各波源がそれぞれ、自分の近くの波源と共同して細いビームをつくります。もし光の場合なら、それらは「光線」とよんでもよいでしょう。それらのビームを構成する波面を大域的につなげてできるものが、ホイヘンスが言うところの包絡面です。二次波が円形であるのに、なぜ最終的にできる波面が直線であるのかが、重ね合わせの結果として説明されたこととなります。

二次波の考えが効果的にもちいられる例として、Fig.3のように、スリットに平面波が入射する場合を考えます。キルヒホッフの理論に従うなら、スリットの開口面上の各点から定量的に定められた二次波を出すことで、スリットを抜けたあとの波動を決定できます。

このとき、図の点  $Q$  のようにスリットの影になる場所でも、開口から出た二次波の影響が及ぶので、振幅は完全には0になりません。これが波の回り込み、すなわち回折現象です。しかし点  $Q$  においては、Fig.2のような強め合う干渉をおこすはずの波源が、スリットによって隠されてしまっています。これは、点  $Q$  を通る光線は存在しないということです。ホイヘンスの原理から定義される波面は、この点の近くでは存在しません。二次波の影響は及んでも、包絡面はつくら



れないからです。

このように、包絡面として決定される波面は、強め合う干渉によって生じた光線の束を考えると等価です。この波面は光線という概念が意味を持つ領域でだけ存在し、影の部分に回り込むことはありません。このような「光線に付随する波面」が、第3章で述べたアイコンナルです。

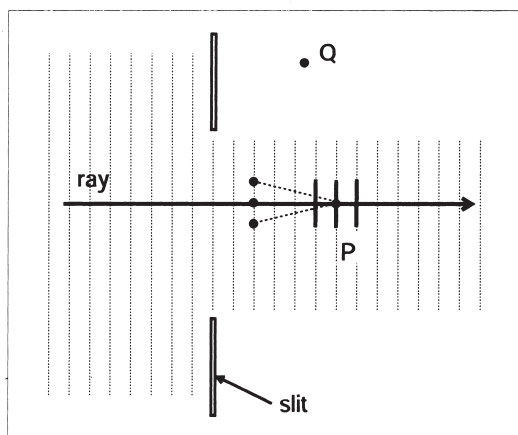


Fig. 3: Wave-fronts and accompanying rays that pass through a slit.

この立場においては、波の波長というものは本質的なはたらきをしません。すなわち、二次波の干渉によって光線の方向が決定される際に、波長の値自身は関与していません。回折を起こさないという点からは、波の波長を0にした極限で実現される状況と考えてもよく、これが「アイコンナル近似」あるいは「幾何光学近似」とよばれるものです。

しかしながら、これは波動性を無視するという点とは違います。光線の行き先を決めているのは、波の重ね合わせから生じる効果です。言い換えれば、そのような強め合う干渉の結果として光線がつくられているということです。

以下の節で議論しようとしているのは、このような「光線に付随した波」です。回折を説明するための二次波は、あまり登場しません。しかしもちろん、光線の行き先を決定する波と、回折を起こす波は同じものです。光線に付随した波は、二次波の重ね合わせを正しく考慮すれば、いつでも真の波動性を発揮できるようなものです。

なお余談になりますが、ホイヘンスの二次波を実在と見なしうるかという問題は、ある意味では答えがありません。なぜなら、波の重ね合わせによって現象をうまく説明できても、重ね合わせのもとになるものが実在であるとは言えないからです。

たとえば、ある方向に向かう二つの波が負の干渉によって打ち消し合うと言うとき、そのような二つの波は、現実には最初から存在しないわけです。エネルギーを伴った現実の波が干渉の結果打ち消しあって、最終的に無に帰すということはありません。

重ね合わせや干渉を考えるときには、いつもこの問題が付きまといまいます。波の現象を「理解する」のは至極難しいことなのです。なお文献[1]の§4.11に、この問題に関する記述があります。

### 7.2.2 不均一な等方性媒質

前節の状況では光線は直進するだけですが、場所によって屈折率  $n$  が異なるような媒質中では、光線は曲げられます。この現象も、やはり二次波の干渉によって説明が可能です。

そのような不均一な媒質中において、ふつうは平面波の進む方向によって波長が違ってくることはありません。この場合、媒質は等方的 (isotropic) であるといえます。このような媒質においては、各点ごとに光の波長  $\lambda$  が定義されます。すなわち、真空中の波長を  $\lambda_0$  とし、 $\lambda = \lambda_0/n$  です。

各点ごとに波長が定義されるといいましたが、本当に広がりをもたない一点を考えたのでは、波長というものが意味をもちません。以下では、場所による  $n$  の変化がゆるやかで、各点の近傍では決まった波長をもった平面波と見なしうるような状況だけを考えることにします。

屈折率が場所によって異なっても、波面上の各点からその場所での波長に比例した大きさの二次波を出すことで、やはり包絡面として次の波面を決定できます。これはホイヘンスの原理の一般化です。この原理によって波面が決定される様子を Fig.4 に示します。図の  $A_{-1}$ ,  $A_0$ ,  $A_1$  は、波面上の三点として考えます。

定性的な説明のためには、この考え方で十分です。しかし、正確な議論をしようとするといろいろと不都合が出てきます。たとえば、波面上の各点から異なる波長の二次波が出るとしても、それらがある一点で観測される際には、それらの波の波長は同一でなければなりません。なぜなら、媒質中の一点の近傍で許される波長の値は一つしかないからです。

そもそも、屈折率が場所で異なれば二次波は円形ではなく、遠くに行くほど形はひずんでしまうはずで、定量的な議論のために、その効果をどう取り入れればよいかがよくわかりません。

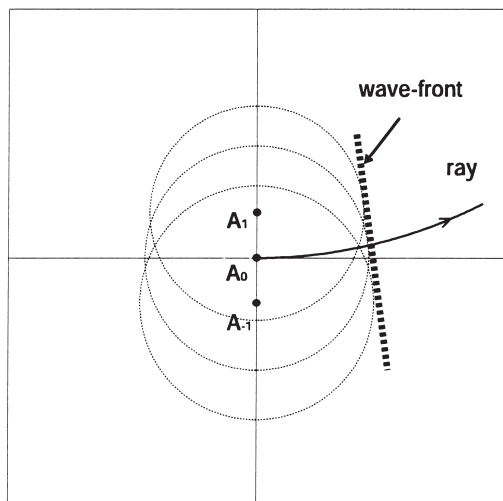


Fig. 4: Huygens' construction of wave-fronts in an inhomogeneous isotropic material.

この場合には、包絡面の考え方をもちいるかわりに、Fig.2で行ったような説明が有効となります。屈折率が場所で異なるときの状況を Fig.5 に示します。

図において、各波源から点Pにやってくる波は、異なる屈折率の場所を通過しています。そこで一般には、Pに到達したときの位相はそろっていません。三つの波源からの波の位相がA<sub>0</sub>に関して停留になるような点P'は、Pとは別の方向に沿って存在し、その方向に光線がつけられます。この効果によって、光線は曲げられ、この光線に直交するように波面が傾きます。

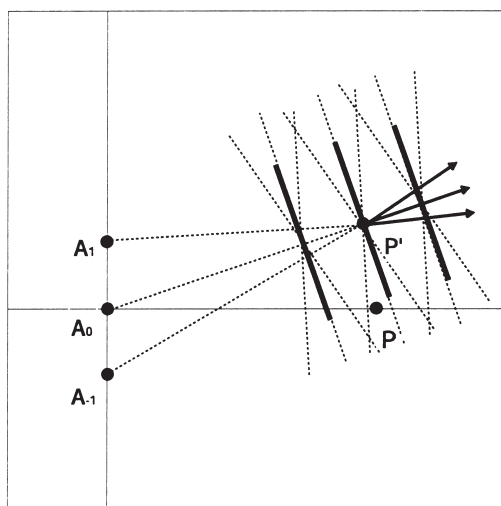


Fig. 5: Superposition of plane waves coming from A<sub>-1</sub>, A<sub>0</sub> and A<sub>1</sub> forms a leaning beam in an inhomogeneous isotropic material.

この説明においては、各波源から観測点に向かう直線に沿った位相変化にだけ注目することで、二次波

の形状がゆがむ問題をさけています。また、P'においては強め合う干渉が起きるわけですが、この点において二次波が重ね合わされる際には、波長は共通で方向だけが異なった平面波になります。P'に至るまでに波長が連続的に変わり、P'に達したときには同じ波長になると考えればよいわけです。

このようにして、光線が曲がるという現象が、やはり強め合う干渉の結果として説明されることとなります。

### 7.2.3 光線経路の決定

原理的には、前節のような作図を細かいステップにわけて繰り返すことで、光線を決定できます。この操作によって光線が進行していく過程で、光線に付随する平面波が同時に得られることとなります。この状況を Fig.6 に示します。

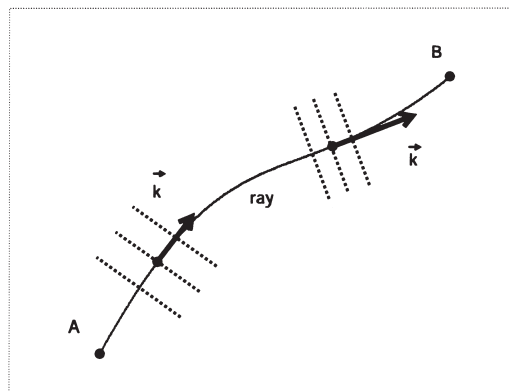


Fig. 6: A ray is accompanied by a plane wave on each point along the ray.

図において、 $k$ は光線の各点にくくりつけられた平面波の波数ベクトルです。 $k$ の方向は波面に直交し、その長さ $k$ は、波が進む方向における位相の変化率です。位相は波長 $\lambda$ ごとに $2\pi$ だけ増えるので、

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1)$$

という関係があります。 $k$ が大きいほど波長は短く、よって位相の進みがはやくなるというわけです。Fig.6を見れば、波面から出た二次波の干渉によって、光線の行き先が逐次的に決められていくというイメージが抱けるでしょう。

各ステップにおいて決定される光線の小部分は、前節まで述べた意味で、位相が停留になるような方向として決められるものです。そこで、それらをつなげてできる全体の光線も、位相に関してのそのような停留性を備えていることが予想されます。

実際、この停留性は、二点をむすぶ光線経路を決定するためのフェルマーの原理と等価です。これを以下で示します。Fig.6 の状況において、A から B に至る光線に沿っての位相の変化量  $\phi_{AB}$  は、次のような積分で与えられます。

$$\phi_{AB} = \int_A^B \mathbf{k} \cdot d\mathbf{x} \quad (2)$$

$\mathbf{k}$  は位相変化率を表すのでしたから、 $\mathbf{k}$  を光線に沿って積分すれば、始点 A から終点 B までの位相の変化量となります。

上式の積分は、光線に沿っての光路長に比例する量になっています。光路長は、実際の長さ  $ds = |d\mathbf{x}|$  にその場所の屈折率  $n = n(\mathbf{x})$  をかけながら足し合わせたもの、すなわち、

$$l_{AB} = \int_A^B n ds \quad (3)$$

で与えられます。ここで (1) と  $n = \lambda_0/\lambda$  の関係もちいれば、 $n ds = (\lambda_0/\lambda) ds = (\lambda_0/2\pi) k ds$ 、よって (2) と (3) は定数だけの違いです。

現実の光線に沿って光路長が停留になるというのが、フェルマーの原理です。結局フェルマーの原理は、「曲線の始点から終点までの位相変化量が停留値をとる」と言っても同じことになるわけです。

なお変分法の理論によれば、曲線全体の停留性はいつでも各微小部分の停留性を意味します。そこで、変分原理にしたがう曲線は、必ず微小部分ごとの逐次的な記述が可能です。これが、オイラーの方程式という常微分方程式です。

### 7.2.4 非等方性媒質

水晶や方解石のように、結晶構造から決まる特定の方向を持つ媒質中では、光の進む方向によって波としての性質が異なってきます。このような媒質は**非等方的 (anisotropic)** であるといえます。

非等方的な媒質中に点光源をおいた場合、そこから広がる波面は球面とはならず、ひずんだ形となります。この形は結晶の対称性によってさまざまですが、光学上の分類で単軸結晶とよばれる比較的単純なものでは、二次波は回転楕円体となります。この場合にも、やはりホイヘンスの原理にしたがって包絡面を求めることで、波面の伝播の様子を知ることができます。これはたとえば Fig.7 のような状況となります。

図からわかるように、波面の各点から出る二次波が強め合う場所は、傾いた方向にできます。この光線

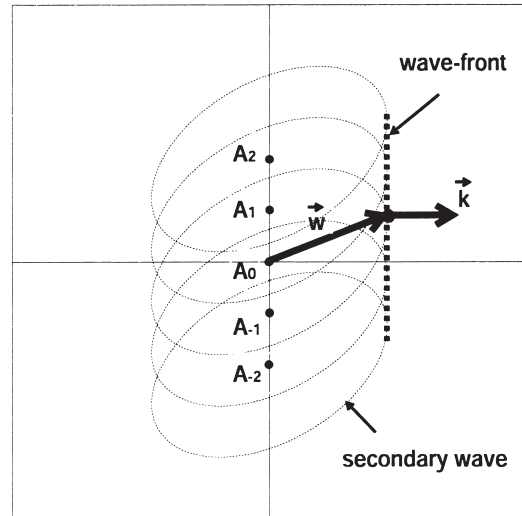


Fig. 7: Construction of wave-fronts by several sources in an anisotropic material.

方向を図では  $\mathbf{w}$  で示していますが、これは包絡面としての波面とは直交しません。

この説明だけでは、何が起きているのかがはつきりしないでしょう。物理的な理解のためには、実際に非等方的媒質中でマックスウェル方程式を解く必要があります。要点だけをかいつまんで述べると次のようになります。

電磁波の平面波解を仮定してマックスウェル方程式に代入してみると、電磁波の進行方向 (波面に垂直な方向) とエネルギーの流れの方向 (光線の方向) が一般に別になることが示されます。媒質の光学的非等方性は、特定の方向に分極しやすいという誘電体としての性質によるものです。電磁波を構成する電場ベクトルが分極の容易な方向に向こうとするので、エネルギーの流れを表すポインティングベクトル (電場と磁場の両方に直交します) は、一般には波面の進行方向を向かなくなります。

さて、このような媒質中での光波のふるまいを理解するために、二次波を平面波成分に分解するという考えが有効になります。これを説明するために、まず均一で等方的な媒質にもどります。Fig.2 において説明したように、各波源から出る二次波は円形波であっても、干渉の結果として最終的には平面波がつけられるのでした。

この現象を次のように考えることができます。各波源から同心円状に広がる波は、いろいろな方向に進む平面波を成分としてもっているから見なされます。(2次元のフーリエ展開です。) 干渉という現象によって、ある一方向に進む平面波成分だけが生き残ります。こ

れが「包絡面をつくる」ということです。どの方向の平面波が選ばれるかは、自分の近くに存在する波源からの二次波との重ね合わせによって決まります。

等方的媒質であれば、波数ベクトル  $\mathbf{k}$  の大きさは方向によらず一定となり、ある一点で許される  $\mathbf{k}$  の終点をつなげば円となります。この様子が Fig.8(a) です。各  $\mathbf{k}$  はそれぞれ一つの平面波に対応しているので、 $\mathbf{k}$  の終点を円上で動かして行けば、対応する平面波は包絡面としての円を形成します。これが二次波の形状となります。

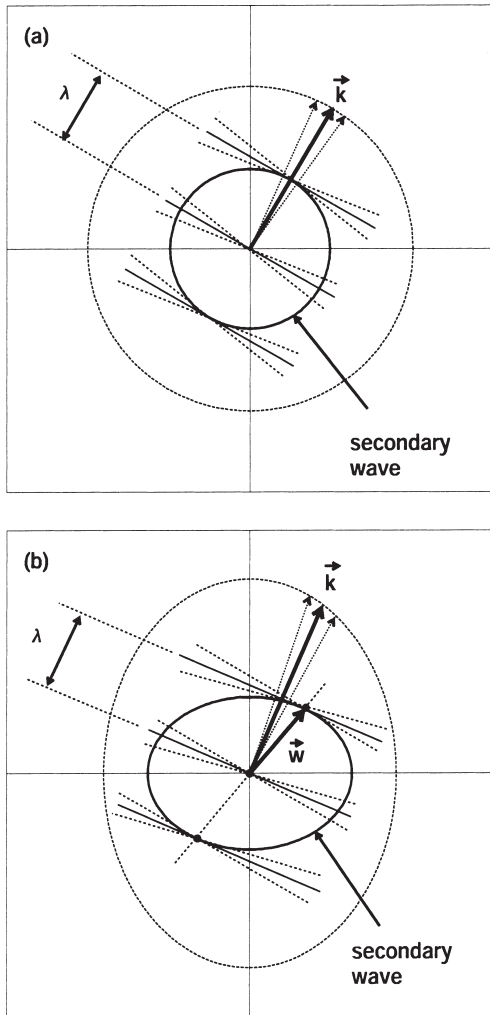


Fig. 8: A  $\mathbf{k}$ -surface and a secondary wave in (a) an isotropic material and (b) an anisotropic material.

すなわち二次波とは、ある一点から出ることのできるすべての平面波の包絡面です。ある  $\mathbf{k}$  と、それとわずかに異なる  $\mathbf{k}$  を重ね合わせることで、局在した平面波がつけられ、その波面に直交する方向に光線がつけられます。結局、光線の方向は  $\mathbf{k}$  の方向と一致します。

次に、非等方的媒質において対応する図を描くと、Fig.8(b) のようになります。ひずんだ二次波を平面波に分解した場合、平面波の進む方向によって  $\mathbf{k}$  の大きさが異なります。これはすなわち、波長が進行方向によって異なるということです。

この場合でも、ある  $\mathbf{k}$  と、それとわずかに異なる  $\mathbf{k}$  を重ね合わせることで、やはり局在した平面波がつけられます。しかし、その  $\mathbf{k}$  の方向と、位相が強め合う点の方向、すなわち光線の向かう方向は一致しなくなります。

$\mathbf{k}$  の終点が描く図形は、一般に媒質を規定するものとなります。3次元空間で考えれば曲面となるので、以下ではこれを「 $\mathbf{k}$  曲面」とよぶことにします。これはたとえば、 $\mathbf{k}$  の成分 ( $k_x, k_y, k_z$ ) にたいしての次のような方程式であらわすことができるでしょう。

$$f(k_x, k_y, k_z) = 0 \quad (4)$$

媒質の各点で  $\mathbf{k}$  曲面が与えられれば、Fig.8(b) のような作図によって二次波の形状がわかり、ある  $\mathbf{k}$  に対応する光線方向もわかります。よって、 $\mathbf{k}$  曲面が媒質を規定するためのすべてです。

さて、フェルマーの原理は等方的媒質におけるものですが、これを非等方的な場合に拡張することができます。停留性を要求すべき積分は、やはり (2) で与えられます。二次波が強め合うような方向に光線が進んでいくことには変わりがなく、光線を決定するのは位相の停留条件です。

等方的な場合と異なる点は、 $\mathbf{k}$  が光線の方向を必ずしも向かないということです。すなわち Fig.9 のような状況です。  $\mathbf{u}$  は光線に接する単位ベクトルです。

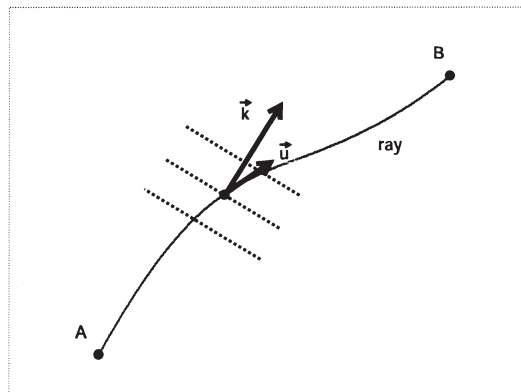


Fig. 9: A ray is accompanied by a plane wave, which decides the course of the ray.

光線上の各点に付随した平面波はひろがりをもっているため、その光線の近傍も無関係ではいらませ



ん。ある曲線を任意に与えたとします。そのすぐ脇を通る別の曲線を考え、それに付随した波を同時に考えれば、二つの曲線に付随した波はうまく連続的につながる保証はありません。もしそれが可能であれば、それらの曲線はすべて、二次波どうしの干渉によって進んでいく光線として実現されるものです。

フェルマーの原理は、光線に沿ってくりつけた平面波が大域的につながって、全体の波面をつくることを要求していることとなります。とすれば、光線の問題がなくても、波面の分布だけを決定することができそうです。このためにもちいられるのが、媒質を規定する  $k$  曲面です。この条件が各点でみたされるような波面を構成できれば、それは実際に存在する波面分布です。

この条件を偏微分方程式として与えるものが、アイコナル方程式です。偏微分方程式の一般理論においては、境界条件の変化の影響が空間を伝わる道すじとして、特性曲線という概念が導入されます。特性曲線とは、今の場合の光線に他なりません。

### 7.2.5 曲線を決定する原理

ここまでの話をすこし抽象化して、一般に空間曲線を決定する手段として (2) の積分を考えてみましょう。

空間に任意に与えた曲線にたいして、その上の各点で、波数ベクトルとよぶ  $k$  をくりつける規則を与えます。これは空間の各点  $x$  ごとに、また曲線の方向  $u$  ごとに変わってよいとして、

$$k = k(x, u) \quad (5)$$

の形で与えられるとします。そして、

$$\phi_{AB} = \int_A^B k(x, u) \cdot dx \quad (6)$$

という積分が停留になることを要求します。これによって、曲線を決定する原理が与えられたことになります。

空間のある一点  $x$  において、 $u$  の終点を単位球面上で動かして、(5) が与える  $k$  の終点をプロットすれば、 $k$  曲面が決まります。光の言葉で言えば、(5) は光線方向  $u$  と波数ベクトル  $k$  の関係を与え、それから  $u$  を消去して、波としての性質だけを取り出したものが  $k$  曲面です。 $k$  曲面がわかれば、二次波の形状も決まります。

この原理によって決定される曲線は、これに付随した波面からの二次波が強め合う方向に進んでいく、と

いう解釈が可能となります。そこで、もし最初に (6) という形の原理が知れていたとすると、それを波動性と結びつけたいくなります。現象として観測されるものが曲線だけであっても、その背後には波動性が隠れていると見なすわけです。その波は、光の場合がそうであるように、回折を起こすような真の波動であるかも知れません。

しかしながら、この「波」はある任意性を含んでいることがわかります。すなわち、何かの関数  $\chi(x)$  の勾配を  $k$  に加えて  $k + \nabla\chi$  としても、勾配ベクトル場の線積分は始点と終点だけで決まるので、(6) の停留性に影響しません。すなわち、決定される曲線は同じものです。

決定される曲線は二次波の干渉によって説明されるわけですから、ここで述べた任意性とは、一般に干渉の結果を変えないようなものであるはずです。Fig.5 の状況で説明すると、 $k$  に  $\nabla\chi$  が加われば、各波源から  $P'$  までの位相差は変化します。しかし、勾配ベクトル場の周回積分は必ず 0 になることから、三点  $A_0$ ,  $A_1$ ,  $P'$  がつくるループに沿った  $k$  の積分は不変です。 $A_0$  と  $A_1$  は等位相面上の点として考えれば、 $A_0 \rightarrow P'$  と  $A_1 \rightarrow P'$  という二つの経路に沿ってやってくる二つの波の位相差は変わりません。つまり、干渉の結果、言い換えれば強度分布に関しては影響がないということです。

ところが、 $k$  が変わるということは、曲線に付随する波自身は「別もの」になってしまうこととなります。また、もちろん対応する二次波の形状も変化することとなります。よって波長という量も一意には定まらないこととなります。

このように、変分原理から示唆されるところの波動には任意性があり、一意に決まるようなものではありません。この任意性が取り払われるためには、位相そのものが観測にかからなければなりません。逆に、干渉の結果としての曲線、あるいは回折の際の強度分布を説明するための波として割り切るなら、任意性はそのまま許されるものです。

## 7.3 電子軌道に付随した波

### 7.3.1 力学の変分原理

電磁場中の電子の運動を考えるためには、時間変数が必要です。電子光学にとっては軌道だけが重要であり、最終的には時間は消去されることとなりますが、先に時間を含めた議論をしておくことにします。



前節までにおいては時間が現れていませんでしたが、それは議論の出発点となった Fig.1 の状況において、波源の振動数  $\omega$  を一定と考えていたからです。これによって、空間的な位相の変化率、すなわち波数ベクトル  $\mathbf{k}$  だけで平面波が指定できたのです。

ある決まった  $\omega$  をもつ系においては、周期  $T = 2\pi/\omega$  ごとに系全体が同じ状態に戻り、よって実質的な時間変化がありません。これは「定常状態」とよぶべきものです。静的な光線経路を扱う立場では、この状況だけ考えればよいわけです。

もし実質的な時間変化まで含めるなら、時間方向の位相変化率としての  $\omega$  も、波を指定する変数に含めなければなりません。このとき平面波は、 $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)]$  という形で表されます。この波は、 $\mathbf{k}$  方向に位相がふえ、時間軸に沿っては振動数  $\omega$  に比例して位相が減少するようなものです。

なお、平面波を  $\exp[i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})]$  と書く場合もありますが、符号の違いは問題にはなりません。本質的なのは、時間の経過とともに  $\mathbf{k}$  方向に進む波は、 $\mathbf{x}$  と  $t$  にかかる位相変化率の符号が逆でなければならないということです。

さて、空間曲線を決定する変分原理を時空間に拡張するとすれば、考えるべき積分は、前節の (6) に時間方向の位相変化を付け足した、

$$\phi_{AB} = \int_A^B \mathbf{k} \cdot d\mathbf{x} - \omega dt \quad (7)$$

という形になるでしょう。ここでの  $A, B$  は、時空間の2点となります。

(6) においては、 $\mathbf{k}$  は位置  $\mathbf{x}$  と曲線方向  $\mathbf{u}$  の関数でした。今は時空間における曲線、すなわち運動を考えるので、その曲線方向は速度ベクトル  $\mathbf{v}$  で指定されます。よって (7) における  $\mathbf{k}$  と  $\omega$  は、時空間の位置  $(\mathbf{x}, t)$  と方向  $\mathbf{v}$  の関数として、

$$\begin{cases} \mathbf{k} = \mathbf{k}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \\ \omega = \omega(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \end{cases} \quad (8)$$

の形で与える必要があります。

前節までにおいて、光線はそれに付随した平面波の重ね合わせによってできている、ということ述べました。光線の行き先は、それらの平面波の位相がそろおう方向として決められました。

時空間においても、考えるべきことは同じです。光線に相当するものは、時空間における曲線としての運動です。そしてその運動は、時間変数を含んだ平面波の重ね合わせでつくられます。前節では、わずかに

異なる  $\mathbf{k}$  の重ね合わせで強め合う方向をつくりました。今の場合、 $\omega$  にも幅をもたせて重ね合わせることで、時空間において強め合う方向をつくります。(先に述べたように、一つの  $\omega$  だけでは運動をつくることはできません。)

そのようにして決定される運動がどんなものになるかは、媒質の性質しだいですが。光の場合の  $\mathbf{k}$  曲面を思い出しましょう。これは、空間のある一点で許される平面波の波数ベクトルを指定するものです。いまの場合  $\omega$  も変数に含めるので、 $\omega$  の値ごとに  $\mathbf{k}$  曲面を指定する必要があります。そこで (4) に対応して、

$$\tilde{f}(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y, \mathbf{k}_z, \omega) = 0 \quad (9)$$

という関係によって媒質を定義できます。あるいは上式を  $\omega$  で解いてしまつて、 $\mathbf{k}$  ごとに対応する  $\omega$  を与える式、すなわち

$$\omega = \omega(\mathbf{k}) \quad (10)$$

の形で与えるほうが便利です。(10) の形の関係式は一般に、媒質の分散関係 (dispersion relation) とよばれます。

さて、(10) の関係式をみたく  $(\mathbf{k}, \omega)$  にわずかな幅をもたせて重ね合わせれば、時空間において位相がそろおう方向が決まります。これは時間ごとに眺めれば、空間のある一点に局在した波が時間とともに動いていく状況です。このようにしてつくられる波は波束 (wave packet) とよばれます。

分散関係 (10) をもつ媒質中で、波束の速度は次式で与えられます。

$$\mathbf{v} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} \quad (11)$$

これは光の場合で、 $\mathbf{k}$  曲面から光線方向  $\mathbf{u}$  が決定されたことに対応します。やはり作図によって上の関係を示すこともできますが、(7) の  $\omega$  にかかる負号のせいでかなりややこしくなるので、ここでは示しません。(時間と空間の本質的な違いに因ることなので、しかたがありません。)

(11) は、重ね合わせのもとになった平面波の速度  $\mathbf{v}_p = \omega/\mathbf{k}$  とは一般に異なります。 $\mathbf{v}_p$  は位相速度、これにたいして (11) は群速度とよばれます。光線に付随した波は光線方向を必ずしも向いていませんでしたが、それと同様、運動に付随した波はその運動と一般には歩調が合っていません。

さてここで、現実の粒子の運動を考えます。まず場の存在しない自由空間において、粒子の運動を決定

する変分原理, すなわちハミルトンの原理は次の積分で与えられました.

$$I_{AB} = \int_A^B \mathbf{p} \cdot d\mathbf{x} - E dt \quad (12)$$

ここで  $\mathbf{p}$  と  $E$  はそれぞれ, 粒子の運動に沿った運動量とエネルギーです. 具体的には次式であたえられます.

$$\begin{cases} \mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \\ E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \end{cases} \quad (13)$$

これらは場所と時刻には依存せず, (12) の積分路の方向  $\mathbf{v}$  にたいして定まる量となっています.

上式を (7) と見比べれば,  $\mathbf{p}$  を  $\mathbf{k}$ ,  $E$  を  $\omega$  に対応させれば, そのまま運動に付随した波が与えられることとなります. もちろん次元を合わせる必要がありますが, そのためには換算定数が必要です. そのような定数が与えられれば, (12) は位相を与える積分におきかえられます.

しかしながら, そのような定数はここでの議論からは導かれません. 逆に言えば, 粒子の運動を説明するためには強め合う方向だけが問題なので, そのような定数の存在を想定するだけよく, 値を知る必要はありません. 光線が決定される際に, 波長は本質的な役割を果たしていなかったことと同じです.

ここでの分散関係, すなわち  $\mathbf{p}$  と  $E$  の関係は, (13) から  $\mathbf{v}$  を消去すれば得られます. §7.2.5 において, (5) から光線方向  $\mathbf{u}$  を消去することで  $\mathbf{k}$  曲面が得られたのと同様です. 結果は次のようになります.

$$\frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2 \quad (14)$$

これから群速度  $dE/d\mathbf{p}$  を求めれば,  $\mathbf{v}$  となることが確認できます. 一方, 波束の成分である平面波の位相速度は, つねに光速  $c$  を超えます.

### 7.3.2 電磁場中の電子軌道

電磁場が存在するときの電子の運動は, 次の積分が停留となる条件から決定されます.

$$I_{AB} = \int_A^B \mathbf{p}_c \cdot d\mathbf{x} - H dt \quad (15)$$

ここで,

$$\begin{cases} \mathbf{p}_c = \mathbf{p} - e\mathbf{A} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - e\mathbf{A} \\ H = E - e\Phi = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - e\Phi \end{cases} \quad (16)$$

です. この場合もやはり, 積分を位相 (に定数をかけたもの) と考えて, 電子に付随した波を考えることができます.

(16) において, 電磁場の寄与は, 電場  $\mathbf{E}$  と磁場  $\mathbf{B}$  によってではなく, スカラーポテンシャル  $\Phi$  とベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  で表されることが重要です. 電磁場とこれらの関係は次式で与えられます.

$$\begin{cases} \mathbf{E} = -\nabla\Phi \\ \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \end{cases} \quad (17)$$

なお, 一般には  $\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \partial\mathbf{A}/\partial t$  ですが, ここでは場はすべて静的な場合だけを考えます.

さて (16) において,  $\mathbf{p}_c$  は正準運動量とよばれるものでした. これは波数ベクトルに対応し, したがって空間的に広がりをもった概念を表します. 速度ベクトル  $\mathbf{v}$  が運動に沿った粒子性を与えるのにたいして,  $\mathbf{p}_c$  は波動性を与えます.  $\mathbf{v}$  と  $\mathbf{p}_c$  は, 運動に沿って定義されるという点では同じようなベクトルですが, 物理的な意味合いはかなり異なったものです.

また,  $H$  は全エネルギーです. 前節と同様に, (16) の両式から  $\mathbf{v}$  を消去すれば, 分散関係が得られます. それを  $H$  で解けば,  $H$  を  $\mathbf{p}_c$  で表した式となり, このときの  $H$  がハミルトニアンとよばれます. これは (10) の形の分散関係に他なりません. すなわち, ハミルトニアンとは「媒質」を規定するものです.

次に, 時間を消去した軌道の議論に移りましょう. このために, 上の変分原理から, いわゆる最小作用の原理に移行します. このために, エネルギー  $H$  が一定の値をもつ電子だけを考慮して, (15) の  $H$  の項が変分に効かないようにします. そうすれば空間部分だけが残り, 軌道を決定する積分は次のようになります.

$$I_{AB} = \int_A^B \mathbf{p}_c \cdot d\mathbf{x} \quad (18)$$

ただし, このままでは  $\mathbf{p}_c$  に速度が含まれるので, まだ時間が消去されたことになりません. 速度を消去するために, エネルギー保存の式をもちいます. 時間が消去された正準運動量は次式のようにになります.

$$\mathbf{p}_c = \sqrt{2me\hat{\Phi}(\mathbf{x})} \mathbf{u} - e\mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad (19)$$

ここで  $\mathbf{u}$  は光のときと同様, 軌道に沿った単位ベクトルです.

(19) における  $\hat{\Phi}$  は, 加速ポテンシャル  $\Phi$  の相対論補正です. (16) における  $\Phi$  には定数だけの任意性がありますが, 加速ポテンシャルは運動エネルギーに対

応するように原点が定義されているので、一意に決まります。

(19)にたいしての積分(18)が、電磁場中での電子軌道を決める変分原理を与えます。これは(6)の形ですから、これでやっとなら、光線にたいするのと同じ形式で電子軌道を扱えることになります。

さて、§7.2.5で議論したように、変分原理から導かれる波には任意性があります。今の場合、(19)の  $p_c$  に任意関数  $\chi(x)$  の勾配を加えても、決定される電子軌道には影響がないということです。

これは結局、ベクトルポテンシャルのゲージ変換に他なりません。すなわち、 $A$  を  $A + \nabla\chi$  で置き換えても、勾配ベクトル場は回転が0なので、(17)から与えられる磁場  $B$  は不変です。これは、電子軌道が不変であるということの意味します。

ここで、(19)をそのまま波数ベクトルとして扱って、これと軌道との関係を考えてみましょう。まず、磁場が存在しない場合は  $A = 0$  なので、 $p_c$  は必ず軌道の方を向きます。光の場合でいえば、等方的な媒質です。そこで、対応する二次波は球面波となります。

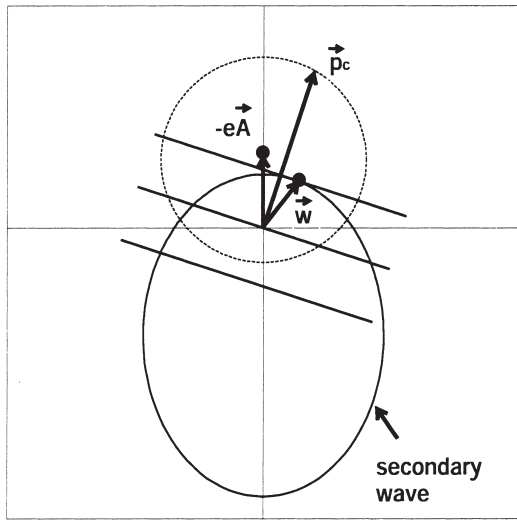


Fig. 10: A  $p_c$ -surface and a secondary wave in the presence of vector potential  $A$ .

磁場が存在すると、 $p_c$  は必ずしも  $u$  の方向を向かなくなるので、非等方的媒質の場合に対応します。たとえばFig.10のようになります。光の場合と同様に、 $p_c$  がつくる曲面から二次波の形状を作図することができます。 $A$  をゲージ変換すれば、ある一点における  $A$  はどうにでも変えられるので、 $p_c$  曲面も二次波の形状も一意には定まりません。

実際に、電子軌道に沿って定まる二次波の形状を描いてみます。Fig.11は、一様な電場中で偏向される電

子軌道と、それに付随した二次波を描いたものです。(二次波の包絡線としての波面によって軌道を決定しながら進んで行きたいところですが、そのような計算は難しいのであきらめます。)

この例では、軌道はある場所で集束されていますが、厳密には一点には集まらず、収差があります。この場合には、すべての軌道に直交する波面を描くことができなくなります。各軌道には波面が付随していますが、それらが連続的につながらない、つまり大域的な一つの波面をつくらないという状況です。このような「焦点」の近傍は、軌道に付随した波ではなく、本来の波動として扱うべき領域です。

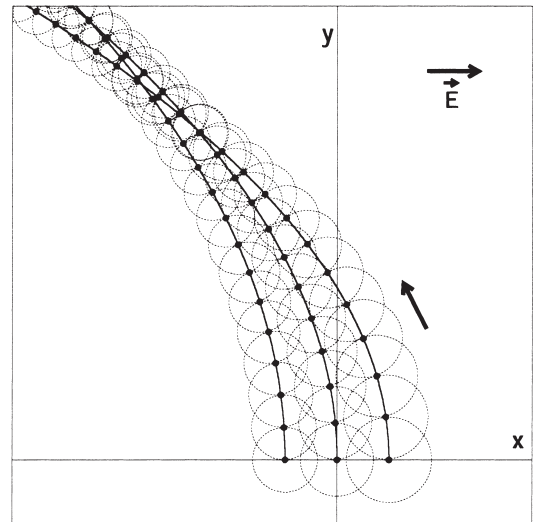


Fig. 11: Huygens' secondary waves accompanied by electron trajectories in a uniform electric field.

次に、一様磁場中の計算例が Fig.12(a) です。ここでも焦点が存在しますが、その近傍における事情は上と同様です。

磁場中での二次波を描くには、磁場に対応するベクトルポテンシャルを決めなければなりません。この図においては、 $z$  方向の一様磁場  $B_0$  に対応する次のような  $A$  をもちいています。

$$A_x = -\frac{1}{2}yB_0, \quad A_y = \frac{1}{2}xB_0, \quad A_z = 0 \quad (20)$$

これは  $A$  が原点のまわりに回転対称となるような選び方です。

別のゲージの選び方として、次のものも可能です。

$$A_x = a - yB_0, \quad A_y = 0, \quad A_z = 0 \quad (21)$$

この  $A$  にたいして同様の図を描くと、Fig.12(b)のようになります。(21)の  $a$  は任意定数であり、0でもよいのですが、図が見やすくなるように値を調整し



ています。) 二次波の形状は図 (a) とはまったく違うものとなり、包絡面としての波面も異なりますが、軌道を決定するための波としては、どちらも同じ機能を果たしています。

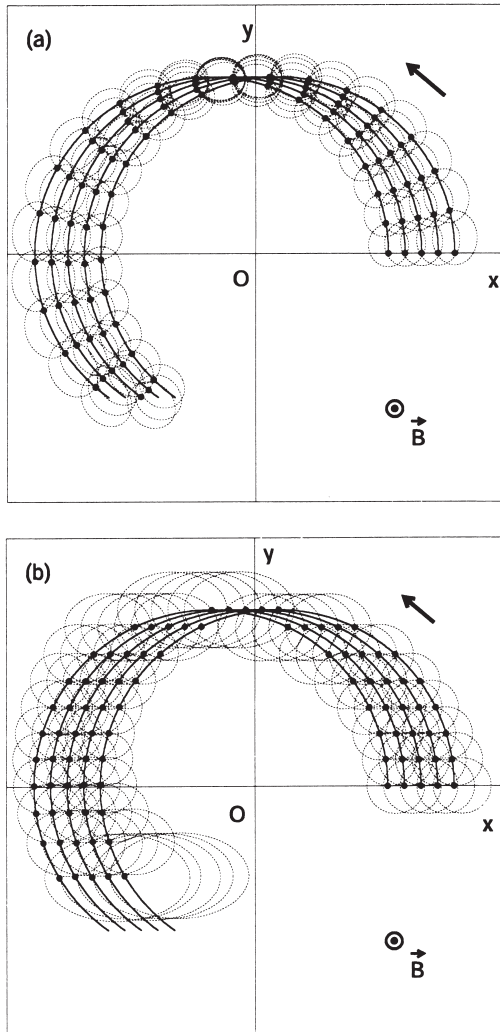


Fig. 12: (a) Huygens' secondary waves accompanied by electron trajectories in a uniform magnetic field. (b) Huygens' secondary waves when a different gauge from (a) is adopted for vector potential  $\mathbf{A}$ .

これらの例から確認されるように、電子波を決めているのは  $\mathbf{E}$  と  $\mathbf{B}$  ではなく、 $\Phi$  と  $\mathbf{A}$  です。一様場中ではすべての点が等価なはずですが、しかし二次波の形状は場所ごとに異なっています。

たとえば、一様な電場中における二次波の形状が場所によらず一定であったなら、電場中で軌道が曲がるということが説明できません。電場は一定であっても、二次波を決定する条件は場所ごとに異なっています。それを直接与えるものが  $\Phi$  であるということです。同様に、磁場は一定であっても、二次波を決定

する  $\mathbf{A}$  は場所ごとに異なっていなければなりません。標語的に言うなら、電磁場は粒子に作用する力を与え、一方そのポテンシャルは、波に作用して位相を変化させる場です。

### 7.3.3 電子の波長

電磁場中の電子波は任意性を伴ったものであり、一意には定まりません。これは電子の波動性が変分原理から導かれたことからの帰結です。電子の波長がいくらであるとかの議論は、本来は意味をなさないわけです。

この任意性は、磁場の存在するときだけではありません。磁場がなくても、回転が 0 であるようなベクトルポテンシャルが存在できるので、やはりゲージの選び方で二次波の形状が変わってしまいます。

また、時間変数を復活させて考えるなら、(16) の  $H$  に含まれるスカラーポテンシャル  $\Phi$  には定数分の任意性があるので、対応する  $\omega$  も一意には定まりません。結局、電子に付随した波とは、波長も振動数も決まった値をもたないようなものです。

電子に付随した波は現実に回折を起こし、したがって真の波動と見なしうるものです。しかし、光の場合とは異なり、位相そのものの違いは観測にかかりません。(電子波の位相速度は、光速を超えるのでした。) そこで、任意性はそのまま受け入れるしかありません。電子波にたいして、水面の波のような実在感を抱くことはできないわけです。

このような状況を踏まえたうえで、適当に制限を課して、電子の波長というものを定義しておくほうがいろいろと計算に便利です。磁場が存在しても、ある一点の近傍で  $\mathbf{A}$  を 0 とすることはいつでもできるので、加速ポテンシャル、すなわち電子の運動エネルギーと波長とを形式的に対応させることが可能です。

このためには、(13) のところで述べた換算定数の値を知る必要があります。光が粒子としてふるまうときの、すなわち光子の運動量  $\mathbf{p}$  とエネルギー  $E$  は、波としての波数  $\mathbf{k}$ 、振動数  $\omega$  と次の関係があることが知られています。

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad E = \hbar \omega \quad (22)$$

ここで  $\hbar = h/(2\pi)$ 、 $h$  はプランク定数です。

この関係がそのまま物質波にも適用されると考えたのが、ド・ブロイです。この仮定を (19) で  $\mathbf{A} = 0$  とおいたものに適用すれば、 $\lambda = 2\pi/k$  の関係をもち

いて,

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me\hat{\Phi}(x)}} \quad (23)$$

が得られます.

電子の波長をこのように仮定して, たとえばスリットや開口による回折パターンを計算すると, 強度分布は現実に観測されるものと一致します. 電場中では, 波長は  $\hat{\Phi}^{1/2}$  に反比例し, 電子を加速すればするほど波長は短くなります. 波長が短いほど位相速度は小さいこととなりますが, 「電子を加速する」というときの速度は群速度ですから, 矛盾はありません.

なお, 量子力学のシュレディンガー方程式は, 変分原理が示唆する波動性をそのまま真の波動と見なすことで導かれるものです. これは, ここで述べてきた任意性をそのまま有していることを意味します. すなわち, 波動関数  $\psi(x)$  自体はゲージの選びかたで変わりますが, 強度分布  $|\psi(x)|^2$  には影響がありません.

## 7.4 幾何収差と波面収差

変分原理のもつ波動論的な意味合いについて, 前節までに述べてきました. 変分原理を収差係数と結びつけるために, 波面収差という概念が導入されます. 本節で基本的な考え方を説明し, 具体的な計算は §7.5 において行います.

### 7.4.1 変分関数の展開

電磁場中の電子軌道を決定する変分原理は, 次の積分の停留条件として与えられました.

$$l_{AB} = \int_A^B (\sqrt{2me\hat{\Phi}} \mathbf{u} - e\mathbf{A}) \cdot d\mathbf{x} \quad (24)$$

これは, 電子軌道に付随した波を直接的な形で示しているわけです. しかし, 電子軌道を決定する原理としてもちいるには, この形のままでは不便です.

電子光学においては, 電子軌道は

$$x = x(z), \quad y = y(z) \quad (25)$$

の形で, すなわち光軸に沿った  $z$  座標を独立変数として与えます. そこで, (24) をこの形の軌道に沿う積分となるように書き換えます.

このために,  $d\mathbf{x} = (dx, dy, dz) = (x', y', 1)dz$ , および  $\mathbf{u} \cdot d\mathbf{x} = |d\mathbf{x}| = \sqrt{1+x'^2+y'^2}dz$  をもちいて,

$$l_{AB} = \int_{z_A}^{z_B} [\hat{\Phi}^{1/2} \sqrt{1+x'^2+y'^2} - \eta(x'A_x + y'A_y + A_z)] dz \quad (26)$$

とします. ただし上式で,

$$\eta = \sqrt{\frac{e}{2m}} \quad (27)$$

と定義しています.

(26) は  $z$  の関数の積分という形になっていて, 電子軌道 (25) を指定すれば積分値が定まります. (26) の右辺全体にかかる定数は変分に寄与しないので, 以下では, 次の関数を変分原理の被積分関数としてもちいることにします.

$$F = \hat{\Phi}^{1/2} \sqrt{1+x'^2+y'^2} - \eta(x'A_x + y'A_y + A_z) \quad (28)$$

上式で定義される  $F$  は, 各  $z$  において (25) で与えられる軌道の値  $(x, y)$  と, その傾き  $(x', y')$  を与えることで値が決まります. この気持ちを込めて  $F = F(x, y, x', y'; z)$  と記して, 対応する変分原理を次のように書きます.

$$\delta \int_{z_A}^{z_B} F(x, y, x', y'; z) dz = 0 \quad (29)$$

(29) は, ふつう変分原理とよばれるものの標準形になっています. 数学としての変分法においては, 被積分関数に 2 階微分以上を含む変分問題も扱われます. しかし光学や力学では, 1 階微分までしか含まないような問題が主体となります. なぜなら, これらの応用においては, 変分原理の積分は曲線の一般化された「長さ」であり, 曲線の線素  $d\mathbf{x}$  は本質的に曲線の 1 階微分であるからです. (弾性体の波動場を扱うときなどは, 高階微分や偏微分が含まれてきます.)

力学において, 運動法則を与える変分原理は時間積分の形で書くのが便利であり, そのときの被積分関数をラグランジアンとよびます. しかし, 今の場合は時間が消去されているので,  $F$  をラグランジアンとよぶのは適当ではないでしょう. 以下では, 単に変分関数  $F$  というよびかたをします.

さて, (29) の形の変分原理には, これと等価な常微分方程式, すなわちオイラーの方程式が存在します. いまの場合は次式で与えられます.

$$\begin{cases} \frac{d}{dz} \frac{\partial F}{\partial x'} - \frac{\partial F}{\partial x} = 0 \\ \frac{d}{dz} \frac{\partial F}{\partial y'} - \frac{\partial F}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (30)$$

これを具体的に書き下せば, 近似のない, 厳密な電子軌道方程式が得られます.

第 4 章において, 電場中の厳密な軌道方程式を  $x, y, x', y'$  を 1 次の微小量と見なしてべき展開し, 最

低次の項だけを抜き出すことで1次軌道方程式を導きました。もし高次の項まで取り入れれば、収差が考慮されます。

このように、1次軌道方程式から出発して、徐々に高次の寄与を取り入れていくことができます。これは、天体力学や量子力学でいうところの摂動展開の手法です。以下では、光学系にたいしてのこの手法を収差展開とよぶことにします。

変分原理をもちいれば、この展開の操作を軌道方程式にたいしてではなく、 $F$ 自身にたいして行うことができます。具体形はのちに示しますが、電磁場が $z$ 軸まわりに軸対称である場合、 $F$ を $x, y, x', y'$ について展開すると偶数次の項のみが現れて、展開は次の形になります。

$$F = F_2 + F_4 + F_6 + \dots \quad (31)$$

ここでもし $F \approx F_2$ と近似して、 $F_2$ にたいして(30)を書き下せば、偏微分によって微分の階数が一つ減って、1次の項のみの微分方程式となります。これが1次軌道方程式に他なりません。

もし近似の次数をあげて $F = F_2 + F_4$ とすれば、 $F_4$ の寄与もやはり階数が一つ減るので、1次軌道方程式に3次の非線形項が付加した方程式が得られます。これが、3次の収差まで考慮した軌道方程式となります。

軌道方程式(30)は、成分 $x(z), y(z)$ についての2階連立の微分方程式です。これにたいして、 $F$ はただひとつのスカラー関数であり、しかも1階微分までしか含まれません。したがって、先に $F$ の展開を済ませてしまうことで、次数ごとに処理していく操作ははるかに簡略化されます。

#### 7.4.2 波面収差

変分原理をもとにして、収差を含んだ軌道方程式を導く方法を前節で述べました。しかし、軌道方程式が得られた時点で変分原理を忘れてしまうことは、粒子性だけを残して波動性を捨て去ることを意味します。

変分原理の積分は、光路長、あるいは位相変化量という意味をもつのでした。もし $F$ を(31)のように展開するなら、光路長も次数ごとの計算が可能になります。そのような積分によって、 $F$ の展開(31)から直接収差を導く方法が、アイコナル法とよばれるものです。

まずFig.13(a)のように、収差のない光学レンズによる、軸上においた点光源の結像を考えます。

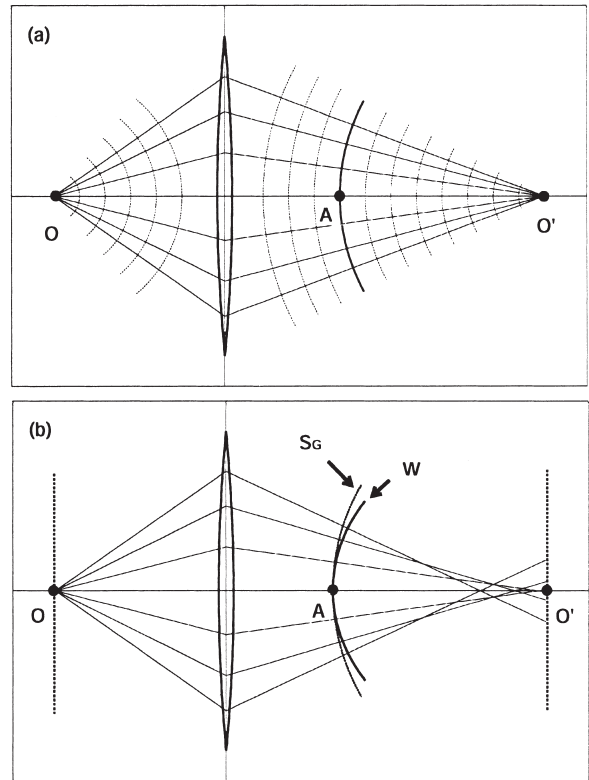


Fig. 13: (a) Propagation of wave-fronts through a lens without geometrical aberrations. (b) Geometrical aberration causes the departure of wave-front from Gaussian reference sphere  $S_G$ .

収差がなければ、軸上物点 $O$ から出た光線はすべて像面の $O'$ に集まります。これを波の伝播として考えるなら、 $O$ からでた球面波が、レンズによって $O'$ に集束する球面波に変換されるということです。この図は模式的なものですが、現実のレンズ中では、物面側と像面側の球面波を連続的につなげた波面ができています。

この図から実感されるように、レンズとは波を集めるものです。単に光線をうまく屈折させるものであると考えただけでは、光学系というものの本質が見のがされてしまいます。波面収差という概念は、この本質的な部分を定式化するための手段となります。

まず、図における各光線に沿っての光路長を考えてみます。光路長とは位相変化に比例する量でしたから、波の山を一つ越えるごとに一定値だけ増えていきます。そこで、図のすべての光線に沿った光路長は同じ値になっています。これが、光線を一点に集めるための「光路長一定の原理」です。波面が図のようななるなら、当然そうでなければなりません。



この原理を逆向きに表現すれば、 $O$  から出た光線がすべて  $O'$  に向かうようにレンズの屈折面が決定できた場合、自動的にすべての光線の光路長は同一になっているということです。この言い方をすると不思議に思えますが、これは光を粒子として逐次的に経路を追う立場と、波として全体を一気に眺める立場との感覚的なギャップによるものでしょう。

ここで、像側の光軸上に一点  $A$  をとり、 $O$  から  $A$  まで光軸に沿って測った光路長を  $[OA]$  と記します。すると、 $O'$  に集束していく球面波の波面のうちで  $A$  を通るものは、 $O$  から出た各光線に沿って、 $O$  からの光路長が  $[OA]$  となる点をつないだものです。図における波面はすべて、 $O$  から等光路長の面です。

さて、もしレンズに収差があったらどうなるでしょうか。この場合、光線は像面で一点に集まらず、像面付近では複雑に交差した光線となります。これらに直交する波面を考えると、点  $A$  を通る波面は球面ではなく、Fig.13(b) のようにひずんだ形状  $W$  になるでしょう。(図は球面収差のある場合を示しています。)

このように、理想的な場合の球面からの波面形状のずれとして、レンズの収差を与えることができます。収差のない場合の波面は**ガウスの参照球面** (Gaussian reference sphere) とよばれ、図では  $S_G$  で示しています。これからの実際の波面のずれを与えるのが**波面収差** (wave-front aberration あるいは wave aberration) とよばれるものです。

以下では、電子の場合を考えて、波面収差の具体的な定義を与えます。まず、 $A$  を通って光軸に垂直な面をアパーチャ面とします。以下の議論においては、レンズ作用をもつ領域は物面  $z = z_o$  からアパーチャ面  $z = z_a$  までに存在し、アパーチャ面から像面  $z = z_i$  までは場のないドリフト空間であると仮定します。この仮定は最終的には取り払うことができますが、これに関してはあとで説明します。

電子軌道に沿っての光路長を与えるものが、変分原理 (29) における積分です。最初に  $F = F_2$  という近似のもとで考えてみます。このときの軌道、すなわち 1 次軌道は収差をもちません。よって、

$$l = \int_{z_o}^{z_i} F_2 dz \quad (32)$$

という積分を  $O$  と  $O'$  をむすぶ 1 次軌道にたいして計算すれば、それらはすべて同じ値を与えるはずで、

次に、同じ  $O$  と  $O'$  をむすぶ 1 次軌道にたいして、

下式の積分を考えます。

$$l' = \int_{z_o}^{z_i} F_4 dz \quad (33)$$

仮に、この結果がすべて 0 であったとすれば、それらの軌道は  $F = F_2 + F_4$  にたいしても停留曲線になるということです。すなわち、 $O$  を出た  $F = F_2 + F_4$  の停留曲線は一点に集まるといふことになり、これは収差がないということの意味します。

$F_4$  は 3 次収差に対応する項でしたから、結局 3 次収差が存在しない条件が、

$$\int_{z_o}^{z_i} F_4 dz = 0 \quad (34)$$

で与えられることになります。

なお、3 次収差がなくなる条件は、 $F_4$  が恒等的に 0 になることではありません。もちろん、仮にそうなれば収差はなくなりますが、これはありえません。なぜなら、たとえレンズ場が存在しないドリフト空間であっても、(28) の  $F$  は無限に高次の項まで含んでいるからです。(光路長の表式が高次の項を含んでいるのは不思議ではありません。)

もし (34) の左辺が値をもつなら、3 次収差が存在することになります。たとえば、ある 1 次軌道に沿っての (34) が負の値になったとしましょう。これは、その軌道に沿っての位相の進みが、収差のない場合に実現される値よりも小さい、つまり位相が遅れていることを意味します。すなわち Fig.13(b) のように、参照球面  $S_G$  にたいして実際の波面  $W$  が像側に押し出されているということです。

$S_G$  と  $W$  のずれは、1 次軌道ごとに変わってきます。そこで、このずれの量を指定するためには、まず 1 次軌道を指定するための変数を用意する必要があります。このために便利なのは、第 5 章で述べた、物面とアパーチャ面を通過するときの座標をもちいるものです。すなわち、これら二面における  $\mathbf{u}_o = (x_o, y_o)$  と  $\mathbf{u}_a = (x_a, y_a)$  の組で 1 次軌道が指定されます。

波面収差は、ある 1 次軌道に沿っての  $S_G$  と  $W$  の距離として定義されます。 $F$  を積分した値は光路長を与えますが、波面収差は光路長ではなく実際の距離として与えます。

$F$  の定義式 (28) にもどれば、場のない領域において、 $F$  が定義する光路長と実際の長さは  $\hat{\Phi}^{1/2}$  のファクターだけ異なります。今はアパーチャ面から像面まではドリフト空間と仮定しているので、この関係を適用できます。像面での軸上ポテンシャル  $\hat{\phi}_i = \hat{\phi}(z_i)$  をもちいるなら、換算ファクターは  $\hat{\phi}_i^{1/2}$  となります。

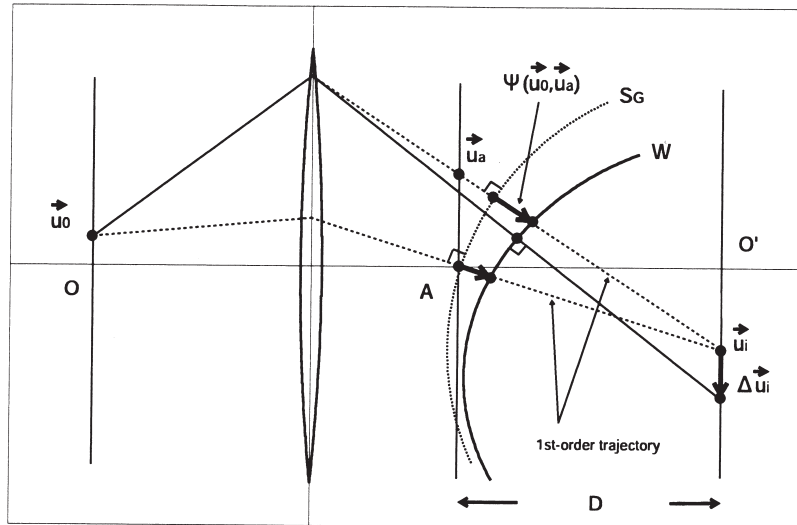


Fig. 14: Illustrating the definition of wave aberration  $\Psi(u_o, u_a)$ .

すなわち,  $F$  の積分値を  $\hat{\phi}_i^{1/2}$  でわれば実際の長さになります。

結局, 波面収差は次の表式で与えられます。

$$\Psi(x_o, y_o, x_a, y_a) = \frac{1}{\hat{\phi}_i^{1/2}} \int_{z_o}^{z_i} F_4 dz \quad (35)$$

この積分路は,  $u_o = (x_o, y_o)$  と  $u_a = (x_a, y_a)$  を通る 1 次軌道です。状況を Fig.14 に示します。(この図は  $\Psi < 0$  の場合です。)

波面収差  $\Psi$  は, 物点  $(x_o, y_o)$  を固定して, アパーチャ面上で定義される関数  $\Psi(x_a, y_a)$  として考えるのがわかりやすいでしょう。これは, その物点から出た波面形状が参照球面からどのようにずれているかを表す関数です。

さて, 最終的に知りたいのは, 像面における座標のずれ, すなわち幾何収差です。幾何収差はやはり 1 次軌道を指定して定まるものです。つまり, 1 次軌道と同じ二点を通る条件のもとで, 収差を含んだ軌道が 1 次軌道と像面でどれだけずれるかを与えます。そこで幾何収差も,  $\Delta x_i(x_o, y_o, x_a, y_a)$ ,  $\Delta y_i(x_o, y_o, x_a, y_a)$  という形になります。

幾何収差は, 各物点にたいして, 波面収差が与える波面形状  $W$  に直交する軌道を考えれば決定できます。Fig.14 における幾何学的な関係から, 3 次収差だけを問題にして高次の項を無視すると, 次の関係式が導かれます。

$$\begin{cases} \Delta x_i = D \frac{\partial}{\partial x_a} \Psi(x_o, y_o, x_a, y_a) \\ \Delta y_i = D \frac{\partial}{\partial y_a} \Psi(x_o, y_o, x_a, y_a) \end{cases} \quad (36)$$

ここで  $D$  はアパーチャ面から像面までの距離です。

波面収差は, (36) の関係によって, 幾何収差を生成する一種の母関数のような働きをします。物点を固定すれば, 幾何収差はアパーチャ面上の関数  $\Psi(x_a, y_a)$  の勾配として与えられます。(  $\Delta x_i, \Delta y_i$  ) をアパーチャ面上のベクトル場として見るなら, それを勾配ベクトル場として与えるようなポテンシャル, すなわち  $\Psi$  が存在するようなものだけが, 現実に生じる収差です。

この事実によって, 幾何収差が像面でつくるボケのパターンにはある種の制約が生じ, 勝手なパターンは取りえないこととなります。この制約とは結局, 波面が存在するための条件です。そしてそれは, レンズとは波を集めるものであるということからの帰結です。電子を粒子として軌道だけを考える立場では, この制約の因ってくるところが理解できません。

ここで, アパーチャ面から像面までにレンズ場が存在する場合について述べておきます。このときは, アパーチャ面を通り過ぎても電子は収差の影響を受け続けるので, アパーチャ面における実際の波面のずれを求めても意味がありません。

この場合に幾何収差に正しく対応するのは, 物面から像面までのすべての収差の寄与を, アパーチャ面における波面のずれとして等価的に表したものです。像面において収差を含んだ軌道の座標と傾きを, 1 次関係をもちいて像面からアパーチャ面まで逆もどしすることで得られる, ある種の虚像としての波面を考えることとなります。(35) の積分の上限が  $z_i$  となっていることで, 計算される波面収差はそのような意味となります。

波面収差は、光学系の結像理論において不可欠なものです。すなわち、波動性を考慮した像形成の解析において、幾何収差の影響を取り入れるための手段を与えるものです。

具体的には、波面収差は、参照球面上の位相のずれを与える量としてもちいられます。その位相を考慮したうえで、参照球面上の各点から、キルヒホッフの理論が与える二次波を出し、それらを像面において重ね合わせます。これは実際には、フーリエ変換の計算となります。

この手順によって、§7.3.2 で出会ったような問題、すなわち焦点近傍の波動を精度よく決定することができます。この手法のポイントは、焦点の少し手前までは、軌道の概念をもちいて波面を決定するということです。これによって、量子力学の波動方程式を直接扱うことをさけることができます。

光学系の波面収差の許容量に関して、レーリーの4分の1波長則 (Rayleigh's quarter wavelength rule) とよばれるものがあります。これは、アパーチャ面上の波面収差の最大値が  $\lambda/4$  以下であれば、点光源像のボケは許容範囲内に収まるとする判断基準です。

この基準は、光学レンズ系の設計の際には、残存収差の許容範囲を決めるものとなります。しかし電子顕微鏡の場合は、電子レンズの収差を補正することが困難であるため、アパーチャの径を決める基準としてはたります。つまり、波面収差がそのような値に収まるまでビームを細く絞りなさいということです。

電子レンズは収差が大きく、かつ電子の波長が小さいために、アパーチャ径は数  $10\mu\text{m}$  程度の非常に小さな値にしなければなりません。必要以上に絞りすぎると今度は回折収差で像がボケはじめるので、どこかに最適条件が存在することになります。これが最適開き角とよばれるものです。(概略は第2章で述べました。)

### 7.4.3 複素数表記

複素数表記を第6章で導入しましたが、それは電子の位置を  $u = x + iy$  という複素数として与えるものです。これにより、電子軌道をベクトルとしての二成分量  $\mathbf{u} = (x, y)$  ではなく、ふつうの数として機械的に処理することが可能となります。

電子光学においては、電子軌道だけでなく、電磁場の分布も複素数で与えます。たとえば、加速ポテンシャル  $\Phi(x, y, z)$  は  $x$  と  $y$  を含むので、軌道を  $u = x + iy$  で表すのなら、 $\Phi$  も  $u$  の関数として書かなければな

りません。もちろん  $\Phi$  の値自身は実数のままです。

一般に  $xy$  平面上で定義された、原点まわりに回転対称な実数関数を考えると、このような関数は  $r^2 = x^2 + y^2$  に関するべき展開として、

$$f(r) = a_0 + a_1 r^2 + a_2 r^4 + \dots \quad (37)$$

の形に書けます。このような関数を、 $u = x + iy$  をもちいて表したいわけです。そのためには  $r^2 = x^2 + y^2$  を  $u$  で書ければいいわけですが、これは可能でしょうか？ ために  $u$  の自乗を計算してみると、 $u^2 = (x + iy)^2 = x^2 - y^2 + 2ixy$  となり、実数ではなく複素数になってしまいます。

もし  $u$  のかわりにベクトル  $\mathbf{u} = (x, y)$  をもちいるなら、内積によって  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = x^2 + y^2$  と表せます。複素数表記でこれに対応するものは、共役複素数  $\bar{u} = x - iy$  をもちいれば可能です。すなわち、 $u\bar{u} = (x + iy)(x - iy) = x^2 + y^2$  となります。

共役複素数をもちいると、回転対称とは限らない任意の実関数  $f(x, y)$  を複素数変数で表すことができます。このために、まず  $u$  と  $\bar{u}$  の表式を並べて書けば、

$$\begin{cases} u = x + iy \\ \bar{u} = x - iy \end{cases} \quad (38)$$

であり、これから  $x, y$  で解けば、

$$\begin{cases} x = \Re(u) = \frac{u + \bar{u}}{2} \\ y = \Im(u) = \frac{u - \bar{u}}{2i} \end{cases} \quad (39)$$

となります。上式は、 $u$  と  $\bar{u}$  から、 $u$  の実数部  $\Re(u)$  と虚数部  $\Im(u)$  を得るための公式です。(39) を任意の関数  $f(x, y)$  に代入すれば、 $u$  と  $\bar{u}$  の入り混じった関数、すなわち  $f(u, \bar{u})$  という形の表現が得られます。

この場合、 $u$  と  $\bar{u}$  を互いに依存する関係ではなく、独立変数であると見なします。そして、(38) を  $x, y$  から  $u, \bar{u}$  への変数変換と考えます。

このような扱いは、 $f(u, \bar{u})$  にたいしての代数的な操作に関しては問題ありません。ふつうに式の変形を行って、もとの表記にもどりたくなったら (38) を代入すればよいわけです。自明でないのは微分の操作です。すなわち、 $f(x, y)$  を  $x, y$  で偏微分したものが、 $f(u, \bar{u})$  を  $u$  と  $\bar{u}$  で偏微分した結果から導かれなければなりません。

微分に関する関係は次のように得られます。 $u, \bar{u}$  を独立変数と見なした場合、(38) の関係と合成関数の微分の公式をもちいれば、

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \bar{u}} = \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial}{\partial \bar{u}} \quad (40)$$



が得られます.  $y$  に関しての微分も同様となり, まとめて書けば,

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial}{\partial \bar{u}} \\ \frac{\partial}{\partial y} = i \left( \frac{\partial}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial \bar{u}} \right) \end{cases} \quad (41)$$

となります.

この公式をもちいると,  $f(x, y)$  の勾配ベクトル場  $\nabla f = (\partial f / \partial x, \partial f / \partial y)$  を,  $f(u, \bar{u})$  にたいしての微分によって得ることができます. このベクトル場に対応するのは, 複素数表記では  $\partial f / \partial x + i \partial f / \partial y$  という複素数値関数です.  $\mathbf{u} = (x, y)$  という二成分量が  $u$  という一つの複素数になったのと同様に, ベクトル場という二成分量は, 複素数表記では一つの複素数値関数で表されます.

そこでまず,

$$\nabla_u = \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \quad (42)$$

という演算子を定義します. この右辺に (41) を入れると,

$$\nabla_u = 2 \frac{\partial}{\partial \bar{u}} \quad (43)$$

という関係が得られます. これは,

$$\begin{aligned} \nabla_u f(u, \bar{u}) &= 2 \frac{\partial}{\partial \bar{u}} f(u, \bar{u}) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} f(x, y) + i \frac{\partial}{\partial y} f(x, y) \end{aligned} \quad (44)$$

であることを意味します. すなわち,  $f(x, y)$  にたいしての二つの偏微分が,  $f(u, \bar{u})$  にたいする一つの偏微分で済んでしまうということです. (これはたまたま勾配の計算が簡単になるというだけで, すべての微分操作に関してこのようなメリットがあるわけはありません.)

さて,  $u\bar{u} = x^2 + y^2$  という量にもどって考えます. これはベクトル表記では  $\mathbf{u} = (x, y)$  の内積  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$  として書けるのでした. しかし, 複素数の世界に内積という概念は存在しません.

一般に, 二つのベクトル  $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$ ,  $\mathbf{b} = (b_1, b_2)$  の内積  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2$  は幾何学的な意味をもち, 座標軸を回転してもこの定義式は不変です. ベクトルとは本来, 座標の向きとは無関係な幾何学的概念をあつかうためのものです. ところが, 複素平面においては実軸と虚軸は明確な区別があり, 座標軸を回転して両成分を混ぜ合わせるようなことはしません.

しかしながら, われわれはもともとベクトル表記から出発して, 計算に便利のように複素数に移ったわ

けです. その過程で, ベクトルがもつ幾何学的な意味を捨ててしまうことは望ましくありません. そこで, 二つの複素数  $a = a_1 + ia_2$  と  $b = b_1 + ib_2$  の「内積」を,  $(a, b) = a_1 b_1 + a_2 b_2$  として定義します. これは (39) をもちいれば,

$$(a, b) = a_1 b_1 + a_2 b_2 = \frac{a\bar{b} + \bar{a}b}{2} \quad (45)$$

と書けます. 任意の複素数  $a, b$  にたいして  $(a, b)$  は実数であり, また  $(a, b) = (b, a)$  です.

これによって, ベクトル表記での便利な概念の多くを複素数表記に移植することができます. たとえば,  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = x^2 + y^2$  に対応して,  $(u, u) = x^2 + y^2$  と書けるわけです. しかし,  $(u, u)$  という表記はあくまで約束した記号であり, 代数的な処理を行う際には, 具体的に  $u\bar{u}$  としなければなりません. 同様に,  $(a, b)$  と書いても実際は (45) の一番右の表式として処理します.

複素数の内積を含む式を変形する際は, ベクトルの内積としての意味を考えるとわかりやすいでしょう. たとえば  $(a, ia)$  は, ベクトルとそれを  $90^\circ$  回転したものの内積なので 0 となります.  $k$  が実数のときだけ,  $(ka, b) = k(a, b)$  とできることに注意しましょう. また一般に,  $(ia, ia) = (a, a)$  であることもすぐわかります.

$(ia, b)$  は少しわかりづらいですが, ベクトル表記にもどせば,  $90^\circ$  回転の行列  $J$  を使って  $(Ja) \cdot b = a_1 b_2 - a_2 b_1$  となります. これは 2 次元ベクトルの外積  $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$  に対応させたいところですが, 外積は本来 3 次元ベクトルにたいしてもちいるべきなので, このような表記は避けるのが無難です. (45) で  $a$  のかわりに  $ia$  とおけば,  $(ia, b) = i(a\bar{b} - \bar{a}b)/2$  と表せます.

#### 7.4.4 回転不変量

収差展開のためには, 変分関数  $F(x, y, x', y'; z)$  を  $x, y, x', y'$  に関してべき展開する作業が必要です. (実際には複素数表記に移してから展開します.) これは単に機械的に行えばよいのですが, しかし光学系が軸対称であることで,  $F$  がとりうる関数形には制約が生じます.

$F$  は電子軌道の位置  $(x, y)$  と傾き  $(x', y')$  で決まる関数であり, 軌道に沿って値が決まるものです. そこで, 系が  $z$  軸に関して対称であれば, 電子軌道を  $z$  軸まわりにある角度だけ回転しても,  $F$  の値は不変でなければなりません.

この条件から、 $F$  が  $x, y, x', y'$  という変数をどのような形で含んでいなければならないかが決まってきます。たとえば、 $x^2 + y^2$  という量は回転に関して不変であり、 $F$  の構成要素となりえます。このようなものを回転不変量とよぶことにします。

$x, y, x', y'$  からつくられる回転不変量として、最低次数の 2 次の量として次のものがあります。

$$x^2 + y^2, x'^2 + y'^2, xx' + yy', xy' - yx' \quad (46)$$

$F$  はこのような量で構成されていなければなりません。よって、 $F$  を  $x, y, x', y'$  に関してべき展開すれば、まず上式の線形結合の形で  $F_2$  が与えられ、その際の係数は一般に  $z$  の関数です。また、上式の任意の二つをかけ合わせて得られる 4 次の項の線形結合として、 $F_4$  が与えられるはずですが、 $F$  の展開が偶数次の項だけからなるということを §7.4.1 で述べましたが、これはこのようにして理解されます。

さて、(46) の 4 つの回転不変量を複素数で表すために、 $u = x + iy$  と  $u' = x' + iy'$  をもちいます。これと前節の内積の記法を使えば、(46) は、

$$(u, u), (u', u'), (u, u'), (iu, u') \quad (47)$$

と書けます。上の最後の式は、ベクトル表記での  $(\mathbf{J}\mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}' = xy' - yx'$  に対応するものです。

(47) の四つの式の間には、次の恒等式が成り立ちます。

$$(u, u')^2 + (iu, u')^2 = (u, u)(u', u') \quad (48)$$

この関係の存在によって、 $F$  を展開したときの  $F_4$  以降の表式は一意には定まらないことになります。たとえば上式をもちいて、 $(iu, u')$  の偶数次のべきを  $(u, u)$ ,  $(u, u')$ ,  $(u', u')$  によって書き直すことが可能です。

結局、 $F$  は複素数表記で (47) とそのべきで表され、 $F(u, \bar{u}, u', \bar{u}'; z)$  という形の関数になります。変数は複素数ですが、 $F$  自身は実数のままです。このように書かれた  $F$  にたいして、オイラーの方程式 (30) は、

$$\frac{d}{dz}(\nabla_{u'} F) - \nabla_u F = 0 \quad (49)$$

という一つの式で与えられます。ここで、前節で定義した  $\nabla_u = 2\partial/\partial\bar{u}$  という演算子と、これに対応した  $\nabla_{u'} = 2\partial/\partial\bar{u}'$  をもちいています。

## 7.5 収差係数の導出

### 7.5.1 変分関数 $F$ のべき展開

本節から、具体的に波面収差の表式を求め、収差係数を導出します。まず波面収差を知るために、変分関数  $F$  を展開して 4 次の項  $F_4$  を求めなければなりません。

出発点となる変分関数  $F$  は (28)、すなわち

$$F = \hat{\Phi}^{1/2} \sqrt{1 + x'^2 + y'^2} - \eta(x'A_x + y'A_y + A_z) \quad (50)$$

です。これをべき展開するためには、まず加速ポテンシャル  $\Phi$  とベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  の展開が必要です。これらは場の関数であり、系は軸対称ですから、どちらも  $r^2 = x^2 + y^2$  のべきで与えられます。最終的にはすべて複素変数で表すことになりませんが、しばらくは実数形のままで議論します。

まず  $\Phi$  の展開は、第 4 章で静電レンズの 1 次軌道方程式を導く際にすでに行っています。 $\Phi$  がラプラス方程式  $\Delta\Phi = 0$  をみたすことをもちいて、次の展開式が導かれました。

$$\begin{aligned} \Phi(r, z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{4^n (n!)^2} \psi^{(n)}(z) r^{2n} \\ &= \phi(z) - \frac{1}{4} \phi''(z) r^2 + \frac{1}{64} \phi^{(4)}(z) r^4 \\ &\quad - \frac{1}{2304} \phi^{(6)}(z) r^6 + \dots \end{aligned} \quad (51)$$

(50) には、 $\Phi$  そのものではなくその相対論補正  $\hat{\Phi}$  が含まれているので、 $\hat{\Phi}$  のべき展開を求めなければなりません。 $\hat{\Phi}$  は、第 2 章で示したように次式で与えられます。

$$\hat{\Phi}(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x}) [1 + \epsilon \Phi(\mathbf{x})], \quad \epsilon = \frac{e}{2mc^2} \quad (52)$$

これに (51) を代入して、べき展開をし直すと次式が得られます。

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}(r, z) &= \hat{\phi}(z) - \frac{\gamma(z)\phi''(z)}{4} r^2 \\ &\quad + \frac{1}{64} [\gamma(z)\phi^{(4)}(z) + 4\epsilon\phi''(z)^2] r^4 - \dots \end{aligned} \quad (53)$$

ここで、

$$\begin{cases} \hat{\phi}(z) = \phi(z) [1 + \epsilon\phi(z)] \\ \gamma(z) = 1 + 2\epsilon\phi(z) \end{cases} \quad (54)$$

とおいています。

上で定義した  $\hat{\phi}(z)$  は、軸上ポテンシャル  $\phi(z)$  にたいして (52) と同じ相対論補正をほどこしたものです。

また  $\gamma(z)$  は、光軸上の電子にたいしてのローレンツ因子  $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2}$  を軸上ポテンシャルによって表したものです。第2章では、一般の位置の関数として  $\gamma(x) = 1 + 2\epsilon\Phi(x)$  を定義しましたが、以下では  $\gamma$  を (54) の意味でもちいます。(53) に関して注意すべきことは、(51) の相対論補正は  $\phi$  を  $\hat{\phi}$  でおきかえることで得られるのではないということです。

さて、(50) に必要なのは  $\hat{\Phi}^{1/2}$  ですが、これはテイラー展開の公式  $\sqrt{1+x} = 1 + x/2 - x^2/8 + \dots$  を適用すれば、次のようになります。

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}^{1/2} &= \\ \hat{\phi}^{1/2} &\left(1 - \frac{\gamma\phi''}{4\hat{\phi}}r^2 + \frac{\gamma\phi^{(4)} + 4\epsilon\phi''^2}{64\hat{\phi}}r^4 - \dots\right)^{1/2} \\ &= \hat{\phi}^{1/2} - \frac{\gamma\phi''}{8\hat{\phi}^{1/2}}r^2 \\ &\quad + \frac{1}{128\hat{\phi}^{1/2}}\left(\gamma\phi^{(4)} - \frac{\phi''^2}{\hat{\phi}}\right)r^4 - \dots \end{aligned} \quad (55)$$

また、(50) において  $\hat{\Phi}^{1/2}$  にかかる因子は、やはり同じテイラー展開の公式によって、

$$\sqrt{1+x'^2+y'^2} = 1 + \frac{1}{2}(x'^2+y'^2) - \frac{1}{8}(x'^2+y'^2)^2 + \dots \quad (56)$$

となります。

つぎに、ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  の展開に移ります。 $\mathbf{A}$  は磁場を  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  として与え、 $\mathbf{B}$  は磁気スカラーポテンシャル  $\Psi$  によって  $\mathbf{B} = -\nabla\Psi$  と与えられます。(  $\Psi$  は波面収差の記号とダブりますが、混乱はないでしょう。 )

$\Psi$  は  $\Phi$  と同様、真空中でラプラス方程式をみたすので、 $\Psi$  の光軸上の値  $\psi(z)$  をもちいれば (51) とまったく同形の展開式が成り立ちます。すなわち、

$$\Psi(r, z) = \psi(z) - \frac{1}{4}\psi''(z)r^2 + \frac{1}{64}\psi^{(4)}(z)r^4 - \dots \quad (57)$$

です。この表式から出発して、最終的に  $\mathbf{A}$  の表式を導くことができます。

まず  $\mathbf{B} = -\nabla\Psi$  の関係から、磁場成分が次のように与えられます。

$$\begin{cases} B_z(r, z) = -\psi' + \frac{\psi'''}{4}r^2 - \frac{\psi^{(5)}}{64}r^4 + \dots \\ B_r(r, z) = \frac{\psi''}{2}r - \frac{\psi^{(4)}}{16}r^3 + \dots \end{cases} \quad (58)$$

しかし、この展開式をそのままもちいるのは、応用の観点からは好ましくありません。加速ポテンシャルの展開の際には軸上の加速ポテンシャル  $\phi(z)$  をも

ちいましたが、これは電子の運動エネルギーに対応する量なのでわれわれが直接理解できます。しかし、磁気スカラーポテンシャルはそうはいきません。通常は磁場分布を決定する関数として、実測の可能な軸上磁場分布  $B(z) = B_z(0, z)$  がもちいられます。

(58) の第一式で  $r = 0$  とおけば  $B(z) = -\psi'(z)$  がわかり、以下ではすべてこの  $B(z)$  をもちいた展開式を考えます。まず (58) は、 $B = B(z)$  をもちいて書き直せば次のようになります。

$$\begin{cases} B_z(r, z) = B - \frac{B''}{4}r^2 + \frac{B^{(4)}}{64}r^4 - \dots \\ B_r(r, z) = -\frac{B'}{2}r + \frac{B'''}{16}r^3 - \dots \end{cases} \quad (59)$$

さて、上式の磁場分布を  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  として与えるような  $\mathbf{A}$  を導かなければなりません。 $\mathbf{A}$  には任意性があるので、たとえ系が軸対称であっても、 $\mathbf{A}$  が軸対称なベクトル場である必要はなく、ゲージ変換によってどうにでも変わってしまいます。

しかし、以下の定式化のためには、軸対称であるように決めるべきです。それ以外の選び方をしても何もよいことはありません。そのような  $\mathbf{A}$  の成分を円筒座標によって ( $A_r(r, z), A_\theta(r, z), A_z(r, z)$ ) のようにおくと、 $A_r = A_z = 0$  としてしまって  $A_\theta(r, z)$  だけをもちいることで、任意の軸対称な  $\mathbf{B}$  をつくりだすことができます。実際  $A_\theta(r, z)$  を下次のように選べば、 $B_z = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rA_\theta)$  と  $B_r = -\frac{\partial A_\theta}{\partial z}$  の関係によって (59) が生成されます。

$$A_\theta(r, z) = \frac{B}{2}r - \frac{B''}{16}r^3 + \frac{B^{(4)}}{384}r^5 - \dots \quad (60)$$

これからデカルト座標成分を求めれば、

$$\begin{cases} A_x(x, y, z) = -\frac{B}{2}y + \frac{B''}{16}yr^2 + \dots \\ A_y(x, y, z) = \frac{B}{2}x - \frac{B''}{16}xr^2 + \dots \end{cases} \quad (61)$$

となります。よって、(50) においてベクトルポテンシャルを含む部分は次のように書けることとなります。

$$x'A_x + y'A_y + A_z = \frac{1}{2}(xy' - yx')(B - \frac{B''}{8}r^2 + \dots) \quad (62)$$

上式を  $x, y, x', y'$  の関数と見た場合に、§7.4.4 で述べた回転不変量のうちの  $r^2 = x^2 + y^2$  と  $xy' - yx'$  で表されていることがわかります。これはもちろん、 $\mathbf{A}$  を軸対称に選んだことによるものです。

以上により、(50) に (55), (56), (62) を代入したものが  $F$  の展開式を与えることとなります。



### 7.5.2 1次軌道方程式

前節の結果をもちいれば、 $F$ の展開がただちに得られます。最初に0次の項 $\hat{\phi}^{1/2}(z)$ がでてきますが、これはオイラーの方程式(30)には寄与しないので、通常は無視されます。ただし、 $F$ の積分値、すなわち光路長の値そのものを問題にする場合は残さなくてはなりません。

1次軌道を決定するのは、2次の項 $F_2$ です。これは次式のようになります。

$$F_2 = \frac{\hat{\phi}^{1/2}(z)}{2}(x'^2 + y'^2) - \frac{\gamma(z)\phi''(z)}{8\hat{\phi}^{1/2}(z)}(x^2 + y^2) - \frac{\eta B(z)}{2}(xy' - yx') \quad (63)$$

これはやはり、§7.4.4の回転不変量で表されていることがわかるでしょう。

この $F_2$ にたいしてオイラーの方程式を適用すれば、1次軌道方程式が導かれます。しかし、磁場が存在する場合は、電子は光軸まわりになせん運動を行い、軌道の $x$ 成分と $y$ 成分は独立ではなくなります。これは $F_2$ の最後の $xy' - yx'$ の項によるものであり、コリオリ力に相当するものです。これによって、上の $F_2$ から導いた1次軌道方程式は $x$ と $y$ にたいしての連立方程式となってしまいます。

第6章で見たように、ラーモア座標系に移ることで軌道のねじれを打ち消すことができます。ラーモア座標系への変換は、軌道方程式ではなく、 $F_2$ にたいして先に済ましてしまうことができます。これは、変分原理が座標とは無関係な幾何学的な意味をもつことによるものです。

$F_2$ を回転座標系に書き換えるために、まず複素数表記に移ります。(63)は複素数表記で、

$$F_2 = \frac{\hat{\phi}^{1/2}}{2}(u', u') - \frac{\gamma\phi''}{8\hat{\phi}^{1/2}}(u, u) - \frac{\eta B}{2}(iu, u') \quad (64)$$

と書けます。上式の $u$ 座標を固定座標として、これにたいして $z$ 軸に沿って回転する $v$ という座標を導入します。両者の関係は、

$$u(z) = v(z)e^{ix(z)} \quad (65)$$

の形におけます。

第6章では一定の角速度で回転する運動座標系への変換を考えましたが、ここでの独立変数は時間ではなく $z$ 座標であり、また磁場強度が $z$ 座標に依存するので、回転角も $z$ の関数 $\chi(z)$ となっています。

まず(65)を微分すると $u' = (v' + ix'v)e^{ix}$ となり、これから次の関係が得られます。

$$\begin{cases} (u, u) = (v, v) \\ (u', u') = (v', v') + 2\chi'(iv, v') + \chi'^2(v, v) \\ (u, u') = (v, v') \\ (iu, u') = (iv, v') + \chi'(v, v) \end{cases} \quad (66)$$

これらをもちいて(64)を書き直したうえで、コリオリ力の項 $(iv, v')$ が打ち消されるように $\chi(z)$ を決めればよいわけです。この条件は次式のように求められます。

$$\chi'(z) = \frac{\eta B(z)}{2\hat{\phi}^{1/2}(z)} \quad (67)$$

この条件のもとで、(64)は次のように与えられます。

$$F_2 = \frac{\hat{\phi}^{1/2}}{2}(v', v') - \frac{\gamma\phi'' + \eta^2 B^2}{8\hat{\phi}^{1/2}}(v, v) \quad (68)$$

これがラーモア座標系で表した $F_2$ です。これにたいしてオイラーの方程式、すなわち $(\nabla_v F_2)' - \nabla_v F_2 = 0$ を書き下せば、

$$(\hat{\phi}^{1/2}v')' + \frac{\gamma\phi'' + \eta^2 B^2}{4\hat{\phi}^{1/2}}v = 0 \quad (69)$$

あるいは、

$$v'' + \frac{\gamma\phi'}{2\hat{\phi}}v' + \frac{\gamma\phi'' + \eta^2 B^2}{4\hat{\phi}}v = 0 \quad (70)$$

が得られます。これが、もっとも一般的な電子レンズの1次軌道方程式です。

上式において、 $v = x + iy$ とにおいて実数形にもどせば、 $x$ と $y$ はそれぞれ独立に上式と同形の方程式、すなわち、

$$\begin{cases} x'' + \frac{\gamma\phi'}{2\hat{\phi}}x' + \frac{\gamma\phi'' + \eta^2 B^2}{4\hat{\phi}}x = 0 \\ y'' + \frac{\gamma\phi'}{2\hat{\phi}}y' + \frac{\gamma\phi'' + \eta^2 B^2}{4\hat{\phi}}y = 0 \end{cases} \quad (71)$$

をみます。この $x, y$ はラーモア座標系におけるものであり、(63)における固定座標系の $x, y$ とは異なります。

上式で $\phi'(z) = \phi''(z) = 0$ とけば、磁場レンズにたいしての1次軌道方程式となります。すなわち、

$$\begin{cases} x'' + \frac{\eta^2 B^2}{4\hat{\phi}}x = 0 \\ y'' + \frac{\eta^2 B^2}{4\hat{\phi}}y = 0 \end{cases} \quad (72)$$

です. この場合の  $\hat{\phi}$  は定数であり, 電子の加速電圧を相対論補正したものです.

また (71) で  $B(z) = 0$  のときは, 第4章ですでに導いた静電レンズの1次軌道方程式となります. 第4章では相対論補正は入っていませんでしたが, ここでは正しく考慮されています. なお,  $B(z) = 0$  なら  $\chi'(z) = 0$  であり, もともと座標変換は必要ありません.

なお (67) は, 磁場レンズにおける像の回転角  $\Delta\chi$  を (ラジアンで) 与えるものです. すなわち (67) を積分して,

$$\Delta\chi = \int_{z_0}^{z_i} \frac{\eta B(z)}{2\hat{\phi}^{1/2}(z)} dz \quad (73)$$

が物面から像面までの回転角となります.

ここで, §7.4.2 における波面収差の議論を思い出しましょう. 物面におけるある一点から出た1次軌道は, すべて像面における同一の点に集束します. これは, (32) の積分をそれらの1次軌道に沿って計算したときに, 同一の値になることを意味します. このことを,  $F_2$  の具体形 (68) と1次軌道方程式 (69) をもちいて, 直接示すことができます. (これはよい演習問題です. 次節以降では  $F_4$  を1次軌道に沿って積分することになるので, その際の定式化を知ったうえで試みて下さい.)

### 7.5.3 $F_4$ の表式

前節において, ラーモア座標系における1次軌道方程式を導くために,  $F_2$  をラーモア座標系に変換しました. 次は  $F_4$  を考慮したいわけですが,  $F_4$  もやはりラーモア座標系のもとで議論すべきです. そこで, もとの  $F$ , すなわち (50) をラーモア座標系に変換したうえで, それを展開して  $F_4$  を導きます.

まず (50) を複素数表記で書き直すと,

$$F = \hat{\phi}^{1/2} \sqrt{1 + (u', u')} - \frac{\eta}{2} (iu, u') \left[ B - \frac{B''}{8} (u, u) + \dots \right] \quad (74)$$

となります. これに (66) をもちいてラーモア座標に移ると次式となります.

$$F = \hat{\phi}^{1/2} [1 + (v', v') + 2\chi'(iv, v') + \chi'^2(v, v)]^{1/2} - \frac{\eta}{2} [(iv, v') + \chi'(v, v)] \left[ B - \frac{B''}{8} (v, v) + \dots \right] \quad (75)$$

ここで  $\chi' = \chi'(z)$  は (67) で与えられます.

(75) を展開すれば, 2次の項  $F_2$  は当然 (68) となります. 次の  $F_4$  の表式を導く作業はかなり大変ですが, 結果のみを記せば次のようになります.

$$\begin{aligned} -F_4 = & \frac{L}{4} (v, v)^2 + \frac{M}{2} (v, v)(v', v') + \frac{N}{4} (v', v')^2 \\ & + \hat{\phi}^{1/2} [P(v, v) + Q(v', v')](iv, v') \\ & + \hat{\phi} K (iv, v')^2 \end{aligned} \quad (76)$$

これは, 四つの回転不変量 (47) を組み合わせてできる4次式となっています. この式において,  $L, M, N$  などは  $\phi(z)$  と  $B(z)$  から決まる  $z$  の関数で, 具体的には次のようになります.

$$\begin{aligned} L = & \frac{1}{32\hat{\phi}^{1/2}} \left( \frac{\phi''^2}{\hat{\phi}} - \gamma\phi^{(4)} + \frac{2\gamma\phi''\eta^2 B^2}{\hat{\phi}} \right. \\ & \left. + \frac{\eta^4 B^4}{\hat{\phi}} - 4\eta^2 B B'' \right) \\ M = & \frac{1}{8\hat{\phi}^{1/2}} (\gamma\phi'' + \eta^2 B^2) \\ N = & \frac{1}{2} \hat{\phi}^{1/2} \\ P = & \frac{\eta}{16\hat{\phi}^{1/2}} \left( \frac{\gamma\phi'' B}{\hat{\phi}} - B'' + \frac{\eta^2 B^3}{\hat{\phi}} \right) \\ Q = & \frac{\eta B}{4\hat{\phi}^{1/2}} \\ K = & \frac{\eta^2 B^2}{8\hat{\phi}^{3/2}} \end{aligned} \quad (77)$$

上式のような名前の付け方は, グラザ [10] に従う伝統的なものです. このようにすると, 上式の  $M$  と倍率を表す  $M$  が重複してしましますが, ドイツ語では倍率の頭文字が  $V$  なので困りません. 英語の本, たとえば [11] では,  $L, M, N$  のかわりに  $L_1, L_2, L_3$  と記しています. しかし本章では混乱の可能性はないと考えて, グラザにそのまま従います.

これでやっと, 波面収差を導くための  $F_4$  の表式が得られたわけです. 波面収差の定義は (35) でしたが, ラーモア座標  $v$  によって複素数表記で表せば,

$$\Psi(v_o, v_a) = \frac{1}{\hat{\phi}_i^{1/2}} \int_{z_o}^{z_i} F_4 dz \quad (78)$$

となります. この積分路は, 物面とアパーチャ面それぞれ  $v_o = x_o + iy_o$  と  $v_a = x_a + iy_a$  を通る1次軌道です. (76) の  $F_4$  は  $v(z)$  と  $v'(z)$  に関する展開という式になっていますが, これらを, 積分路としての1次軌道に置き換えればよいわけです. そこで, まず準備として,  $v_o$  と  $v_a$  を通る1次軌道の表式を導く作業を次節で行います.

### 7.5.4 1次軌道の指定

1次軌道方程式の一般解は、第4章で述べたように、線形独立な二つの基本解の線形結合として与えられます。基本解の選び方として一番便利なのは、物面において初期条件  $g(z_0) = 1, g'(z_0) = 0$  をみたす  $g(z)$  と、 $h(z_0) = 0, h'(z_0) = 1$  をみたす  $h(z)$  です。これらをもちいて、一般の初期条件  $x_0 = x(z_0), x'_0 = x'(z_0)$  のもとでの解は、

$$x(z) = x_0 g(z) + x'_0 h(z) \quad (79)$$

で与えられます。

一方、波面収差を求める際に必要なのは、物面とアパーチャ面を通る点を指定したときの1次軌道の表式です。そこで、それら二面における境界条件として  $s(z_0) = 1, s(z_a) = 0$  をみたす解  $s(z)$  と、 $t(z_0) = 0, t(z_a) = 1$  をみたす  $t(z)$  を基本解としてもちいます。Fig.15 にこれらを示します。

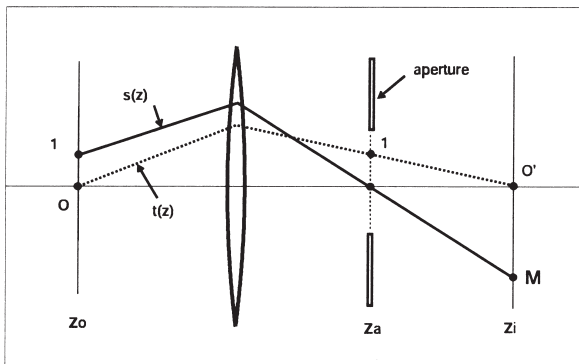


Fig. 15: Fundamental solutions of the first-order trajectory equation,  $s(z)$  and  $t(z)$ .

$s(z)$  と  $t(z)$  をもちいれば、一般の境界条件  $x_0 = x(z_0), x_a = x(z_a)$  のもとでの解は次式となります。

$$x(z) = x_0 s(z) + x_a t(z) \quad (80)$$

そこで、目的であった(78)の積分路は、複素数表記のもとで次の形で与えることができます。

$$v(z) = v_0 s(z) + v_a t(z) \quad (81)$$

さて、最終的に収差係数の数値を決定する際には、 $s(z)$  と  $t(z)$  を数値的に与える必要があります。しかし、1次軌道方程式を数値的に解くには初期条件が必要であり、一方、 $s(z)$  と  $t(z)$  がみたすべき条件は境界条件となっています。そこで、最初に  $g(z)$  と  $h(z)$  を求めてしまい、これらの線形結合で  $s(z)$  と  $t(z)$  を

表すようにします。これを行うための、 $g(z), h(z)$  と  $s(z), t(z)$  の関係を次に求めておきます。

$s(z)$  と  $t(z)$  が一般の(79)の形で表されるのは確かなので、まず両者を次のようにおきます。

$$\begin{cases} s(z) = s_0 g(z) + s'_0 h(z) \\ t(z) = t_0 g(z) + t'_0 h(z) \end{cases} \quad (82)$$

この  $s(z)$  と  $t(z)$  にたいして上記の境界条件を要求すると、係数が決定されて、次の結果が得られます。

$$\begin{cases} s(z) = g(z) + s'_0 h(z), & s'_0 = -\frac{g_a}{h_a} \\ t(z) = t'_0 h(z), & t'_0 = \frac{1}{h_a} \end{cases} \quad (83)$$

ここで、 $g_a = g(z_a), h_a = h(z_a)$  とおいています。 $g(z)$  と  $h(z)$  が数値的に求まれば  $g_a$  と  $h_a$  もわかるので、上式によって  $s(z)$  と  $t(z)$  が具体的に与えられることとなります。

なお、系の倍率は  $M = g(z_i) = s(z_i)$  で与えられ、これは符号を含んでいます。Fig.15 のように一個のレンズで結像される場合は、倒立像がつくられるので  $M < 0$  であり、そして  $t'_0 > 0$  です。しかし、系の途中で中間像がつくられるような場合には  $M > 0$  となり、アパーチャ面の位置によっては  $t'_0 < 0$  となることがありえます。

次に、あとで必要になる関係式をいくつか導いておきます。第4章で述べたエミッタンスのことを思い出しましょう。1次軌道にたいするトランスファーマトリックスが、次式で定義されました。

$$\begin{pmatrix} x(z) \\ x'(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(z) & h(z) \\ g'(z) & h'(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} \quad (84)$$

上式の右辺の行列がトランスファーマトリックス  $T(z)$  です。これは物面での軌道の座標と傾き  $(x_0, x'_0)$  を一般の位置  $z$  に運ぶはたらきをします。

$T(z)$  の行列式  $W(z)$  はロンスキアンとよばれ、 $xx'$  平面上で囲まれた領域、すなわちエミッタンスの面積拡大率を与えるのでした。これは次式で与えられます。

$$W(z) = g(z)h'(z) - g'(z)h(z) = \frac{\hat{\phi}_0^{1/2}}{\hat{\phi}(z)^{1/2}} \quad (85)$$

これから、次の関係式が得られます。

$$\hat{\phi}^{1/2}(gh' - g'h) = \hat{\phi}_0^{1/2} \quad (86)$$

この右辺は定数なので、左辺も定数、すなわち  $z$  によらない量となります。



(86)に(83)を代入すれば,  $g, h$ のかわりに  $s, t$ をもちいた次の関係式が得られます.

$$\hat{\phi}^{1/2}(st' - s't) = t'_o \hat{\phi}_o^{1/2} \quad (87)$$

この左辺においてとくに  $z = z_i$  とおくことで, 次式が得られます.

$$Mt'_i \hat{\phi}_i^{1/2} = t'_o \hat{\phi}_o^{1/2} \quad (88)$$

一方,  $t'_i$  は, アパーチャ面から像面までの距離  $D$  と次の関係にあります. ただしこれは, §7.4.2 で述べた意味での虚像としての関係です.

$$t'_i = -\frac{1}{D} \quad (89)$$

ここで得られた(88)と(89)をあとでもちいます.

### 7.5.5 波面収差

前節で導いた積分路の表式(81)を(76)に代入します. すると,  $F_4$  は  $v_o$  と  $v_a$  に関する4次多項式として整理されます. 結果は次のようになります.

$$\begin{aligned} -F_4 = & \frac{A}{4}(v_o, v_o)^2 + \frac{B}{4}(v_a, v_a)^2 + C(v_o, v_a)^2 \\ & + \frac{D}{2}(v_o, v_o)(v_a, v_a) + E(v_o, v_o)(v_o, v_a) \\ & + F(v_a, v_a)(v_o, v_a) \\ & + [e(v_o, v_o) + f(v_a, v_a) + c(v_o, v_a)](iv_o, v_a) \end{aligned} \quad (90)$$

これらの展開係数となっている  $A, B$  などの具体形は次のようになります.

$$\begin{aligned} A &= Ls^4 + 2Ms^2s'^2 + Ns'^4 \\ B &= Lt^4 + 2Mt^2t'^2 + Nt'^4 \\ C &= Ls^2t^2 + 2Mss'tt' + Ns'^2t'^2 - Kt'_o{}^2\hat{\phi}_o \\ D &= Ls^2t^2 + M(s^2t'^2 + s'^2t^2) + Ns'^2t'^2 + 2Kt'_o{}^2\hat{\phi}_o \\ E &= Ls^3t + Mss'(st)' + Ns'^3t' \\ F &= Lst^3 + Mtt'(st)' + Ns't'^3 \\ e &= t'_o\hat{\phi}_o^{1/2}(Ps^2 + Qs'^2) \\ f &= t'_o\hat{\phi}_o^{1/2}(Pt^2 + Qt'^2) \\ c &= 2t'_o\hat{\phi}_o^{1/2}(Pst + Qs't') \end{aligned} \quad (91)$$

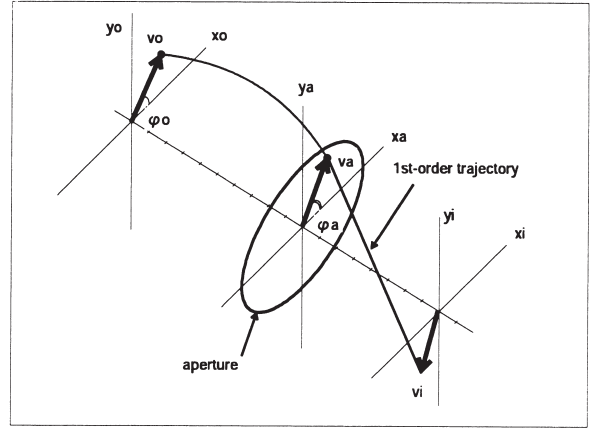


Fig. 16: Illustrating the coordinates representing wave aberration  $\Psi$ .

これらの表式の導出過程で  $st' - s't$  が現れますが, これは(87)をもちいて  $t'_o\hat{\phi}_o^{1/2}/\hat{\phi}^{1/2}$  に置き換えています.

(90)を(78)に代入すれば, 求めている形での波面収差の表式が得られます. すなわち次のようになります.

$$\begin{aligned} \Psi(v_o, v_a) = & -\frac{1}{\hat{\phi}_i^{1/2}} \left[ \frac{\tilde{A}}{4}(v_o, v_o)^2 + \frac{\tilde{B}}{4}(v_a, v_a)^2 \right. \\ & + [\tilde{F}(v_o, v_a) + \tilde{f}(iv_o, v_a)](v_a, v_a) \\ & + [\tilde{C}(v_o, v_a) + \tilde{c}(iv_o, v_a)](v_o, v_a) \\ & + \frac{\tilde{D}}{2}(v_o, v_o)(v_a, v_a) \\ & \left. + [\tilde{E}(v_o, v_a) + \tilde{e}(iv_o, v_a)](v_o, v_o) \right] \end{aligned} \quad (92)$$

ただし上式において,  $A, B$  の積分を  $\tilde{A}, \tilde{B}$  などと置いています. すなわち,

$$\tilde{A} = \int_{z_o}^{z_i} Adz \quad (93)$$

などです.

系の軸対称性を反映して, 変分関数  $F$  が回転不変量(47)で表されたように, 波面収差もまた同じ対称性を反映しています. すなわち, 次の四つの量の組み合わせとなっています.

$$(v_o, v_o), (v_a, v_a), (v_o, v_a), (iv_o, v_a) \quad (94)$$

これらはすべて実数であり,  $v_o$  と  $v_a$  を同じ角度  $\theta$  だけ回転して  $v_o \rightarrow v_o e^{i\theta}$ ,  $v_a \rightarrow v_a e^{i\theta}$  としたときに, 値が不変です. すなわち, (94)はこの意味での回転不

変量となっています。(92)の波面収差は、これらの組み合わせでつくられる4次式の一般形になっています。ただし、恒等式(48)をもちいることで $(iv_o, v_a)^2$ の項は消去されています。

(94)の四つの量は、 $v_o = r_o e^{i\varphi_o}$ 、 $v_a = r_a e^{i\varphi_a}$ と書いて具体的に書き下せば、より意味がはっきりします。すなわち、

$$\begin{cases} (v_o, v_o) = r_o^2 \\ (v_a, v_a) = r_a^2 \\ (v_o, v_a) = r_o r_a \cos(\varphi_a - \varphi_o) \\ (iv_o, v_a) = r_o r_a \sin(\varphi_a - \varphi_o) \end{cases} \quad (95)$$

となります。変数の意味をFig.16に示しておきます。

(95)をもちいれば、(92)は次のように書かれます。

$$\begin{aligned} \Psi(r_o, r_a, \varphi) = & -\frac{1}{\hat{\phi}_i^{1/2}} \left[ \frac{\tilde{A}}{4} r_o^4 + \frac{\tilde{B}}{4} r_a^4 \right. \\ & + [\tilde{F} \cos \varphi + \tilde{f} \sin \varphi] r_o r_a^3 \\ & + \frac{1}{2} [\tilde{C} \cos 2\varphi + \tilde{c} \sin 2\varphi] r_o^2 r_a^2 \\ & + \frac{1}{2} (\tilde{C} + \tilde{D}) r_o^2 r_a^2 \\ & \left. + (\tilde{E} \cos \varphi + \tilde{e} \sin \varphi) r_o^3 r_a \right] \end{aligned} \quad (96)$$

上式において、 $\varphi = \varphi_a - \varphi_o$ とされています。波面収差の角度依存性が $\varphi$ だけで表されることは、やはり系の軸対称性の反映です。上式は、 $\varphi$ 依存性として $\cos \varphi$ 、 $\sin \varphi$ 、 $\cos 2\varphi$ 、 $\sin 2\varphi$ を含んでいます。高次収差を考えると、さらに高調波の成分が現れてきます。すなわち高次収差によって、より細かく波打つような波面形状となります。

波面収差の $\varphi$ 依存性が定数とコサインの項だけであれば、 $v_o$ と光軸を含む平面に関して波面収差が対称となります。 $\varphi$ のサインの項は、同じ面に関して反対称な成分を表します。そのような項は、小文字の名前の関数 $e$ 、 $f$ 、 $c$ が与えるものです。これらはいずれも、磁場が存在しなければ0となります。すなわち(77)の定義によって、 $B(z) = 0$ のときは $P = Q = 0$ となり、 $e$ 、 $f$ 、 $c$ はいずれも0です。

なお、(92)あるいは(96)における $\tilde{A}$ の項は、アパーチャ面の座標に依存しないので幾何収差には寄与せず、通常は無視されます。この項は、軸外物点から出てアパーチャ面の中心を通る軌道(主光線)にたいしての、波面のずれに対応します。もしこの項だけがあった場合、ガウス参照球面はアパーチャ面の座標

とは無関係に一定値だけずらされて、半径が変わるだけです。よって幾何収差は発生しません。(Fig.14ではこの項の寄与も考慮されています。)

光学レンズの設計においては、レイトレースをしながら光線に沿った光路長を計算し、それによって波面収差を決定することが行われます。その際は、あらかじめ波面収差を展開するための適当な関数を用意しておいて、その展開係数をレイトレースによってフィッティングします。

この展開のために、**ゼルニケの円多項式**(Zernike's circle polynomial)とよばれるものがよくもちいられます。これは単位円板上の直交多項式の性質をもち、展開が一意的です。かつ、(96)で現れるような収差に対応する項から構成されるので、光学上の分類のために都合のよいものです。

しかし電子光学系においては、レイトレースによって電子の波長と同程度の精度を出すのは難しいので、このような計算は行われません。

### 7.5.6 幾何収差

目標としていた幾何収差の表式は(36)、あるいは複素数表記では次式によって与えられます。

$$\Delta v_i = D \nabla_{v_a} \Psi(v_o, v_a) \quad (97)$$

この右辺の $\Psi$ に(92)を代入し、 $\nabla_{v_a} = 2\partial/\partial \bar{v}_a$ という演算を行えばよいわけです。

このような計算は、慣れていないとやっかいです。そこで代表として、(92)のうちで $\tilde{F}$ を含む項、すなわち

$$\Psi(v_o, v_a) = -\frac{1}{\hat{\phi}_i^{1/2}} \tilde{F}(v_o, v_a)(v_a, v_a) \quad (98)$$

を取り出して、これにたいしての計算過程を示しておきます。まず、

$$\begin{aligned} (v_o, v_a)(v_a, v_a) &= \frac{v_o \bar{v}_a + \bar{v}_o v_a}{2} v_a \bar{v}_a \\ &= \frac{1}{2} (v_a \bar{v}_a^2 v_o + v_a^2 \bar{v}_a \bar{v}_o) \end{aligned} \quad (99)$$

これから、

$$\nabla_{v_a} (v_o, v_a)(v_a, v_a) = 2v_a \bar{v}_a v_o + v_a^2 \bar{v}_o \quad (100)$$

となり、よって(97)から次式が得られます。

$$\Delta v_i = -\frac{D}{\hat{\phi}_i^{1/2}} \tilde{F} (2v_a \bar{v}_a v_o + v_a^2 \bar{v}_o) \quad (101)$$

このような計算を (92) の他の項にたいしても行えばよいわけです。結果は次式のようになります。

$$\begin{aligned} \Delta v_i = & -\frac{D}{\hat{\phi}_i^{1/2}} \left[ \tilde{B} v_a^2 \bar{v}_a \right. \\ & + 2(\tilde{F} + i\tilde{f}) v_a \bar{v}_a v_o + (\tilde{F} - i\tilde{f}) v_a^2 \bar{v}_o \\ & + (\tilde{C} + i\tilde{c}) \bar{v}_a v_o^2 + (\tilde{C} + \tilde{D}) v_a v_o \bar{v}_o \\ & \left. + (\tilde{E} + i\tilde{e}) v_o^2 \bar{v}_o \right] \end{aligned} \quad (102)$$

通常、上式を次のように書きます。

$$\begin{aligned} \Delta v = & C_S v_a^2 \bar{v}_a + C_L v_a \bar{v}_a v_o + C_R v_a^2 \bar{v}_o \\ & + C_A \bar{v}_a v_o^2 + C_F v_a v_o \bar{v}_o + C_D v_o^2 \bar{v}_o \end{aligned} \quad (103)$$

上式において、 $C_S$  は球面収差、 $C_L$  と  $C_R$  はコマ、 $C_A$  は非点、 $C_F$  は像面湾曲、 $C_D$  は歪曲にたいしての、それぞれの収差係数を与えます。

各収差係数を、積分の形にもどして整理しておきます。

$$\begin{aligned} C_S &= \sigma \int_{z_o}^{z_i} B dz \\ C_L &= \sigma \int_{z_o}^{z_i} 2(F + if) dz \\ C_R &= \sigma \int_{z_o}^{z_i} (F - if) dz \\ C_A &= \sigma \int_{z_o}^{z_i} (C + ic) dz \\ C_F &= \sigma \int_{z_o}^{z_i} (C + D) dz \\ C_D &= \sigma \int_{z_o}^{z_i} (E + ie) dz \end{aligned} \quad (104)$$

ここで、

$$\sigma = -\frac{D}{\hat{\phi}_i^{1/2}} = \frac{M}{t'_o \hat{\phi}_o^{1/2}} \quad (105)$$

です。(105) の最後の等号は、(88) と (89) をもちいています。この最初の表式からわかるように、いつでも  $\sigma < 0$  です。

### 7.5.7 収差係数の意味について

光学レンズ、あるいは軸対称な静電レンズがもつ収差の一般形に関しては第5章で述べましたが、ここではベクトル表記をもちっていました。同じ一般論を複素数表記で行くと次のようになります。

まず、3次の幾何収差の一般形は次のようにおけます。

$$\Delta v_i = \sum_{p+q+r+s=3} C(pqrs) v_o^p \bar{v}_o^q v_a^r \bar{v}_a^s \quad (106)$$

ここで  $C(pqrs)$  が収差係数であり、一般には複素数です。

まず系が軸対称であることから、 $v_o$  と  $v_a$  を光軸まわりに同じ角度  $\theta$  だけ回したとき、 $\Delta v_i$  も同じ角度だけ回転しなければなりません。すなわち、 $v_o \rightarrow v_o e^{i\theta}$ 、 $v_a \rightarrow v_a e^{i\theta}$  としたときに、 $\Delta v_i \rightarrow (\Delta v_i) e^{i\theta}$  となるべきです。

この条件を (106) に課すと、 $p - q + r - s = 1$  という条件が得られ、許される  $(pqrs)$  の組は、(0021)、(1011)、(0120)、(2001)、(1110)、(2100) の六つとなります。これらがそれぞれ、(103) の  $C_S$ 、 $C_L$ 、 $C_R$ 、 $C_A$ 、 $C_F$ 、 $C_D$  に対応します。

収差係数が6個存在して、それらがすべて任意の複素数をとりうるとすれば、実数としての自由度は12個あることとなります。ところが、(104) の表式からわかるように、まず  $C_S$  と  $C_F$  は実数です。また、 $C_L$  と  $C_R$  は一般に複素数ですが、これらは独立ではなくて、 $C_L = 2\bar{C}_R$  という関係があります。そこで、収差係数もつ実数としての自由度は四つ減って、全部で8個ということになります。

このような余分な制約は、軸対称性からではなく、収差を生成する波面収差が存在するという条件から要求されるものです。波面収差 (92) のもつ自由度は、幾何収差に寄与しない  $\tilde{A}$  の項を除いて8個あります。これは、実数関数としての波面収差が、軸対称な系においてもちうる自由度です。これがそのまま幾何収差のとおりうる自由度となります。

物面のある一点から出た軌道によって波面がつくられなければならない、その波面の存在条件は、軸対称性の要求よりも強いわけです。このような考察は、波面収差をもとに幾何収差を導出するという定式化によって、はじめて可能となるものです。

収差係数の計算例、および実際の収差パターンの様子は後の章で示すことにして、ここでは各収差係数の数式上の注意を述べておきます。

まず、球面収差の表式は  $\Delta v_i = C_S v_a^2 \bar{v}_a$  です。これをベクトル表記で書き直してみます。 $v_a \bar{v}_a = (v_a, v_a)$  が  $v_a \cdot v_a$  に対応することを考えれば、 $\Delta v_i = C_S (v_a \cdot v_a) v_a$ 、あるいは成分ごとに書けば、

$$\begin{cases} \Delta x_i = C_S (x_a^2 + y_a^2) x_a \\ \Delta y_i = C_S (x_a^2 + y_a^2) y_a \end{cases} \quad (107)$$



となります。この表式は、第5章で静電レンズの球面収差を説明したときにすでに示したものです。\$C\_S\$ は、磁場が存在しても実数のままです。

ここで、(104) の \$C\_S\$ の表式において、(91) の \$B\$、および \$\sigma\$ の具体形を入れると、球面収差の表式として次式が得られます。

$$\Delta v_i = \left( \frac{M}{t'_o \hat{\phi}_o^{1/2}} \int_{z_o}^{z_i} (Lt^4 + 2Mt^2t'^2 + Nt'^4) dz \right) v_a^2 \bar{v}_a \quad (108)$$

ここで (82) より \$t(z) = t'\_o h(z)\$、また軸上物点にたいして (81) から導かれる \$v\_a = v'\_o/t'\_o\$ の関係をもちいれば、上式は、

$$\Delta v_i = \left( \frac{M}{\hat{\phi}_o^{1/2}} \int_{z_o}^{z_i} (Lh^4 + 2Mh^2h'^2 + Nh'^4) dz \right) v_o'^2 \bar{v}_o' \quad (109)$$

となります。これを倍率 \$M\$ でわれば、第5章でのべた物面換算の収差の表式が得られます。すなわち、

$$\begin{cases} \Delta v_o = C_S^{(o)} v_o'^2 \bar{v}_o' \\ C_S^{(o)} = \frac{1}{\hat{\phi}_o^{1/2}} \int_{z_o}^{z_i} (Lh^4 + 2Mh^2h'^2 + Nh'^4) dz \end{cases} \quad (110)$$

となります。

電子顕微鏡において普通に球面収差係数といえば、上式の \$C\_S^{(o)}\$ のことです。これは、うまく部分積分を繰り返すと被積分関数は自乗の和の形となり、したがっていつでも \$C\_S^{(o)} > 0\$ であることが証明されます。これが、電子レンズの球面収差はつねに定符号であるというシェルツァーの定理です。(証明の詳細は [11] にあります。)

次にコマ収差係数を考えます。コマの表式は、

$$\begin{aligned} \Delta v_i &= C_L v_a \bar{v}_a v_o + C_R v_a^2 \bar{v}_o \\ &= 2\sigma(\tilde{F} + i\tilde{f})v_a \bar{v}_a v_o \\ &\quad + \sigma(\tilde{F} - i\tilde{f})v_a^2 \bar{v}_o \end{aligned} \quad (111)$$

となります。これもベクトル表記で書き直したいところですが、簡単にはいきません。上式の \$C\_L\$ の項にたいしては、球面収差のときと同様に \$v\_a \bar{v}\_a v\_o \to (v\_a \cdot v\_a)v\_o\$ とできます。しかし \$v\_a^2 \bar{v}\_o\$ は、直接にはベクトル表記で書くことができません。

このためには、

$$v_a^2 \bar{v}_o = 2(v_o, v_a)v_a - (v_a, v_a)v_o \quad (112)$$

という関係をもちいます。(右辺から左辺への証明はすぐにできます。) この右辺は直接ベクトルで置き換えられ、また虚数単位 \$i\$ は \$90^\circ\$ 回転の行列 \$J\$ で置き換えることで、結局 (111) はベクトル表記で次のように与えられます。

$$\begin{aligned} \Delta v_i &= \sigma(\tilde{F} + 3\tilde{f}J)(v_a \cdot v_a)v_o \\ &\quad + 2\sigma(\tilde{F} - \tilde{f}J)(v_o \cdot v_a)v_a \end{aligned} \quad (113)$$

これを導く際に、(112) の関係によって (111) の二つの項が混ぜ合わされるので、(111) の二項と (113) の二項は対応しなくなります。

(113) の表記によれば、収差係数は行列であるということになり、コマ収差係数をこのような行列として定義しても構わないわけです。ただし、もし \$(Jv\_o) \cdot v\_a\$ のような項の使用を許すなら、上式はまた違った表現で置きかえられ、ベクトル表記で収差を表す方法は一意には決まりません。一方、複素数表記ではそのような任意性はありません。

なお、静電レンズの場合のコマは、\$\Delta v\_i = C\_K(v\_a \cdot v\_a)v\_o + 2C\_K(v\_o \cdot v\_a)v\_a\$ という形で、\$C\_K\$ は実数でした。よって、\$C\_K = \sigma\tilde{F}\$ であることがわかります。

静電レンズにおいて、コマが存在するときの点光源の像は、彗星の尾のような形をしていました。磁場が存在して \$C\_L\$ と \$C\_R\$ が複素数となると、光軸を中心とした回転方向に彗星の尾が押し流されたような、傾いたパターンとなります。

次に、非点と像面湾曲を考えます。これらを一緒に記せば、

$$\begin{aligned} \Delta v_i &= C_A \bar{v}_a v_o^2 + C_F v_a v_o \bar{v}_o \\ &= \sigma(\tilde{C} + i\tilde{c})\bar{v}_a v_o^2 \\ &\quad + \sigma(\tilde{C} + \tilde{D})v_a v_o \bar{v}_o \end{aligned} \quad (114)$$

です。これも、コマのときと同様の方法でベクトル表記で書くことができて、

$$\begin{aligned} \Delta v_i &= 2\sigma(\tilde{C} + \tilde{c}J)(v_o \cdot v_a)v_o \\ &\quad - \sigma(\tilde{D} - \tilde{c}J)(v_o \cdot v_o)v_a \end{aligned} \quad (115)$$

となります。

静電レンズの場合には、非点と像面湾曲は \$\Delta v\_i = 2C\_{A1}(v\_o \cdot v\_a)v\_o + C\_{A2}(v\_o \cdot v\_o)v\_a\$ という形でした。これを (115) と見比べれば、静電レンズの収差係数は \$C\_{A1} = \sigma\tilde{C}\$、\$C\_{A2} = \sigma\tilde{D}\$ で与えられることがわかります。

ベクトル表記では、非点が \$C\_{A1}\$、像面湾曲が \$C\_{A1} + C\_{A2}\$ となりましたが、複素数表記では \$C\_A\$ が非点、\$C\_F\$

が像面湾曲となり、たがいに分離してくれます。これも複素数をもちいることのメリットです。

最後に歪曲ですが、これはベクトル表記で次のように書けます。

$$\Delta v_i = \sigma(\tilde{E} + \tilde{e}J)(v_o \cdot v_o)v_o. \quad (116)$$

よって静電レンズでは  $C_D = \sigma\tilde{E}$  となります。静電レンズでは歪曲は光軸にたいして放射状に像が歪むだけですが、磁場によって  $\tilde{e}$  の項が入ると、光軸まわりに一方向に押し流すような歪みがかかります。

本章では、軸対称電子レンズの収差係数の表式を導く過程を示しました。このような計算は、誰かが一度やってくれれば、あとはそれを利用するだけでいいわけです。しかしながら、たとえば自分で考案したレンズやアナライザにたいして最適化設計を行なおうとすれば、収差係数の表式を自分で導く必要があります。あるいは、そのような論文を読むために、本章で述べたような手順を理解しておく必要があります。

イメージングの機能をもったエネルギーアナライザにたいして収差係数の表式を導き、それをもとに最適化を行った例をのちの章で紹介する予定です。

## 7.6 まとめ

今回は、波面収差をもとにして、電子レンズの収差係数を導出する過程を述べました。それと平行して、電子の波動性を扱うための基本的な考え方についても説明しました。要点をまとめると次のようになります。

(1) 光線のふるまいを決めるのは、光線に付随した平面波の干渉である。すなわち、ホイヘンスの二次波の強め合う干渉によって光線がつくられている。フェルマーの原理は、光線に付随した波の表式を直接与えるものである。

(2) 電子の運動を決定する変分原理によって、電子に付随した波の表現が与えられる。この波が強め合う方向として電子軌道が説明される。この波には任意性があり、波長は一意には決まらないが、観測可能な量には影響しない。

(3) 電子軌道に付随した波から波面が構成され、それは収差によって変形を受ける。像側の波面の球面からのずれが、波面収差として定義される。

(4) 波面収差は、1次軌道に沿った変分関数の積分から与えられ、これが収差係数と結びつく。この関係をもちいることで、高次の寄与を含んだ軌道方程式を経ることなく、収差係数の表式が得られる。

## 7.7 文献紹介

光学における干渉、回折理論に関しては、代表として次のものを挙げておきます。

[1] 尾崎義治他訳, ヘクト・光学 (第4版訳) I-III, 丸善 (2003); E. Heccht, Optics, 4th ed., Benjamin (2002)

[2] 草川徹他訳, 光学の原理 (第5版訳) I-III, 東海大学出版会 (1974); M. Born and E. Wolf, Principles of Optics, 6th ed., Pergamon (1980)

[1] は、あまり式をもちいずに高度な内容までていねいに書かれています。本格的な [2] を読む際にも助けとなります。

結晶光学、とくに非等方性媒質中の電磁波のふるまいに関しては、上の二つのほかに次を参照してください。

[3] 中山正敏, 物質の電磁気学, 岩波書店 (1996)

[4] 富山小太郎訳, ファインマン物理 II 光・熱・波動, 岩波書店 (1968)

光学における波面収差、およびその多項式展開に関しては、[2] の他に次のものがあります。

[5] 渋谷真人, 大木裕史, 回折と結像の光学, 朝倉書店 (2005)

[6] 小倉磐夫, 現代のカメラとレンズ技術, 写真工業出版社 (1982)

光学における変分原理とホイヘンスの原理については次がありますが、いずれもかなり高度です。

[7] 安藤昭一他訳, アーノルド・古典力学の数学的方法, 朝倉書店 (1980)

[8] 山本義隆, 中村孔一, 解析力学 I, II, 朝倉書店 (1998)

電子軌道に沿っての位相変化とベクトルポテンシャルに関しては、次にわかりやすい解説があります。

[9] 宮島龍興訳, ファインマン物理学 III 電磁気学, 岩波書店 (1969)

電子光学の収差理論、波面収差に関しては、次のものがあります。

[10] W. Glaser, Grundklagen der Electronenoptik, Springer (1952)

[11] P. W. Hawkes and E. Kasper, Principles of Electron Optics, Academic (1989)

像面とは限らない、一般の位置での収差を与えるアイコナル法に関しては [11] で説明されています。